

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Université de Batna
Faculté Des Sciences de l'Ingénieur
Département d'Electronique



Mémoire

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de Magister en Electronique

OPTION

Technologie des semi-conducteurs et dispositifs photovoltaïques

PAR

Kouras Sid-Ali

THEME

**Etude et simulation d'un micro-capteur
chimique à base de FET**

Soutenu le : 31 / 01 / 2011

Devant le jury :

<u>Président :</u>	Dr. A. BENHAYA	Prof.	U. Batna
<u>Rapporteur :</u>	Dr. R. MAHAMDI	Prof.	U. Batna
<u>Examineurs :</u>	Dr. H. BOURIDAH	M.C. (A)	U. Jijel
	Dr. F.DJEFFAL	M. C.(A)	U. Batna

Remerciements

Mes remerciements s'adressent tout d'abord au Dieu tout puissant de m'avoir donné tous ce que je possède et de guider mes pas vers le chemin du savoir.

Je tiens à exprimer ma haute gratitude, mes profonds respects et mes sincères remerciements et reconnaissances d'abord à Monsieur R. MAHAMDI Professeur au Département d'Électronique, Université Hadj Lakhdar Batna qui m'a guidé avec grande patience tout au long de l'élaboration de ce travail.

J'adresse mes chaleureux remerciements à Monsieur A.BENHAYA Maître de Conférences au Département d'Électronique, Université Hadj Lakhdar Batna, pour avoir accepté de présider le Jury de ce mémoire.

Mes sincères remerciements sont adressés à Monsieur F. DJEFFAL Maître de Conférences au Département d'Electronique, Université de Batna, qui ma fait l'honneur de s'intéresser à ce travail, pour ses aides précieuses, et pour m'avoir honoré en acceptant d'examiner ce modeste travail.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude et ma reconnaissance à Monsieur H.BOURIDAH Maître de Conférences à l'Université de Jijel, qui m'ont fait l'honneur de participer au jury et examiner ce travail.

Je tiens également à remercier Madame le Professeur F. MANSOUR Directrice du LEMEAMED (Laboratoire d'Etude des Matériaux Electronique pour Applications Médicales), Département d'Électronique, Université Mentouri de Constantine, qui m'a fait l'honneur de s'intéresser à ce travail en acceptant de m'intégrer dans son laboratoire.

Dédicace

Je dédie ce modeste
travail

A mes très chers
parents

Je trouve ici l'occasion
de leur exprimer ma
gratitude la plus sincère

A mon frère Mohamed
Hamza

A mes sœurs Rima et
Zyeneb

A mon encadreur R

. Mahamdi

**A l'ensemble des
enseignants**

**A tous mes collègues et
amis**

**A tous ceux qui me sont
chers**

Table des matières

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

Chapitre I : Etude bibliographique sur les capteurs ISFETs

I. INTRODUCTION	5
II. LES CAPTEURS CHIMIQUES	5
II.1. Les Capteurs Ampérométriques	5
II.2. Les Capteur Conductimétriques	6
II.3. Les Capteur Potentiométriques.....	7
II.4. D'autre type de Capteurs	8
II.4.a. Les capteurs chimiques à base de fibres optiques	8

II.4.b. Les capteur de composition gazeuse	8
III. LE CAPTEUR CHIMIQUE DE TYPE ISFET	9
III.1. Principe de fonctionnement.....	9
III.1. Le ChemFET (ISFET).....	12
III.1.1. Principe de fonctionnement des ChemFET	12
III.1.2. Principe physico-chimique de détection	13
III.1.3. La structure Electrolyte-Oxyde- Semi conducteur	14
IV. LA DOUBLE COUCHE ELECTRIQUE	15
IV.1. Théorie de la Double Couche Diffuse.....	16
III.1.1. L'équation de Poisson Botzmann	16
III.1.2. L'équation de Grahame	20
IV.2. Limitation de la théorie de Poisson Boltzmann	22
IV.3 La Couche de Stern	23
V. CONCLUSION	28

Chapitre II: Les Méthodes Numériques

I. INTRODUCTION	31
II. EQUATION AUX DERIVEES PARTIELLES	32
II.1. Position du problème	32
II.2. Expression des dérivées partielles	32
II.3. Conditions aux limites	34
II.2.1. Les conditions aux limites de Dirichlet	34
II.2.2. Les conditions aux limites de Neumann	35
III. RESOLUTION DE PROBLEME AUX DERIVEES PARTIELLES.....	35
II.1. Méthode de séparation de variables.....	36
II.1.1. Méthode de transformation de Laplace	36
II.1.2. Méthode de Green	36
II.2. Méthodes Approximatives.....	37
II.3. Méthode Numériques	38
II.3.1. Méthode des différences finies	39
II.3.2. Méthode des éléments finis	40
II.3.2.a. Principe de la méthode.....	40
II.3.2.b. Etape de base de la méthode des éléments finis	40
II.3.2.c. Discrétisation du domaine.....	41
II.3.2.d. Aproximation par éléments finis.....	41
II.3.2.e. Construction des fonctions d'interpolation	42

II.3.2.f. Calcul des matrices élémentaires	43
II.3.2.g. Résolution du système d'équations	44
IV. LE LOGICIEL Comsol Multiphysics	44
IV.1. Introduction	45
IV.2. L'interface graphique (le navigateur de modèle)	45
IV.3. Modélisation à l'aide du <i>Graphical User Interface</i>	46
II.3.1. Dessin de la géométrie	47
IV.4. Modélisation de la physique et des équations	47
IV.4.1. Variable et expression	48
IV.4.2. Constantes	48
IV.4.3. Expression des Variables	48
IV.4.4. Variable de Couplage	49
IV.4.5. Bibliothèque des coefficients/ matériaux	49
IV.5. Introduction des propriétés des domaines et sous-domaine	50
IV.6. Introduction des conditions aux limites	50
IV.7. Création de maille ou maillage	51
IV.7.1. Eléments de Maille	51
IV.7.2. Création de mailles libres	52
IV.7.3. Les paramètres globaux	52
IV.8. Résolution du problème	53
IV.8.1. Sélection du type d'analyse	54
IV.8.2. Progression de la résolution	54
V. CONCLUSION	55

Chapitre III: Modélisation du pH-ISFET

I. Introduction	57
II. Modélisation numérique d'un pH-ISFET :	57
III. Modélisation numérique de la partie électronique MOSFET :	58
III.1. Définition du Modèle	59
III. 1.1. Géométrie du matériau	59
III. 1.2. Domaine d'équation	59
III. 1.3. Condition aux limites	60
III.2. Le Mode d'application Diffusion	61
III. 2.1. Formulation en PDE	61
III. 2.2. Condition aux Limites	61

<i>Concentration</i>	61
<i>Flux diffusif</i>	61
<i>Limite Couche Mince</i>	62
<i>Symétrie Axiale</i>	62
III.3. Le Mode d'application Electrostatique	62
III. 3.1. Formulation en PDE	62
III. 3.2. Condition aux Limites	62
<i>Déplacement Electrique</i>	63
<i>Charge de Surface</i>	63
<i>Zero charge /Symmetry</i>	63
<i>Potentiel Electrique</i>	63
<i>Ground</i>	63
<i>Continuité</i>	63
<i>Limite Couche Mince</i>	64
<i>Symétrie Axiale</i>	64
IV. Résultat de la Modélisation de la partie électronique du Capteur	65
IV.1. Maillage	65
IV.2. Résolution du problème	65
V. Modélisation de la partie électrochimique du Capteur (l'électrolyte)	66
V.1. La théorie de Debye-Huckel : l'équation de PB linéarisé	69
V.2. La validation analytique de l'équation de PB	70
V.3. Présentation du modèle et aspects numériques	70
V.4. Limitation de la validité de l'équation de Poisson Boltzmann	73
V.5. L'équation Modifiée de Poisson Boltzmann (MPB)	73
V.6. La convergence de l'équation de PB et MPB	76
V.7. Le couplage des équations MPB et de Navier-Stokes	77
V.8. L'équations d'électro-osmose	78
VI. Résultat de la modélisation de la partie électrochimique du capteur	79
VI.1. Paramètres Numériques	79
VI.2. Résultats Numériques	80
VII. Couplage des différentes parties du capteur	82
VI.1. Paramètres Numériques	82
VI.2. Résultats Numériques	83
VI.3. Caractéristiques électriques de L'ISFET	85
VI.4. Sensibilité du capteur	86
VIII. Interprétation	87
IX. Implantation de la membrane Si ₃ N ₄	89

X. Conclusion.....	91
--------------------	----

Chapitre IV: Simulation de circuits de mesure de pH pour ISFET

I. Introduction.....	93
II. Instrumentation des ISFETs..	94
III. Méthode de mesure du potentiel électrochimique	95
IV. Quelques circuits de mesure.	96
IV.1 Circuit de type pont avec diode zener	97
IV.2 Circuit de type pont avec source de tension band-gap	97
IV.3 Circuit de mesure à base de pont de Wheatstone.....	98
IV.4 Circuit différentiel avec le système ChemFET/ReFET	99
IV. Présentation du simulateur ORCAD-PSpice.....	100
IV. Résultat de simulations (PSpice).....	100
IV. Le Circuit de mesure conventionnel CVCC.	103
IV. Conception d'une carte d'interface pour un banc de mesure pour capteur ISFET	106
IV.1 Principe	106
IV.2 Description du circuit.....	107
IV. Conclusion.	108
Conclusion générale	111
Bibliographie	114
Abstract	

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Durant ces dernières années, le domaine des capteurs chimiques à effet de champ ou ChemFETs (Chemically Modified Field Effect Transistors) a connu un développement remarquable. Ceci étant le résultat de trois facteurs principaux qui ont à la fois vivement animé la recherche dans ce domaine et fortement incité à développer de nouveaux capteurs. Le premier de ces facteurs est le besoin très vif en capteurs fiables qu'entraîne la croissante sévérité des normes dans tous les domaines à savoir : environnement, alimentation, pharmacie, sécurité domestique et industrielle, monitoring médical, etc. Le second facteur est lié à la généralisation de l'automatisation dans le génie des procédés. Quant au troisième facteur, celui-ci fait appel à l'intrusion récente en force des méthodes de micro fabrication de l'électronique dans la technologie de réalisation des capteurs. Ce dernier point est sans doute le plus notable car il donne accès au domaine des fabrications collectives avec les avantages qui lui sont liés de bas coût d'où les capteurs jetables deviennent envisageables, de gain en fiabilité et d'adaptation aux microcircuits. Ces avantages ont naturellement orienté la conception des capteurs vers la miniaturisation à l'échelle micro / millimétrique.

Dans le cadre de notre étude nous nous intéressons aux capteurs chimiques à ion sélectif à effet de champ ou ISFETs (Ion Sensitive Field Effect Transistor) développés en 1970 par P. Bergveld [1]. Ces derniers pourront remporter un grand succès par leurs applications dans le domaine médical, afin d'assurer la surveillance de certains paramètres dans le sang (pH, pK, pCa, pCO₂,etc), de l'urine ou des tissus prélevés.

Grace à leur petite taille, leur réponse rapide, leur production en volume élevée en plus, d'une basse impédance de sortie et la possibilité d'intégration de l'électronique avec le capteur sur une même puce, les ISFETs ont pu s'imposer dans l'industrie par rapport aux électrodes de mesures de pH en verre (la méthode la plus courante utilisée pour mesurer le pH). Tous ces avantages sont réunis pour rendre ces capteurs largement utilisables dans le domaine biomédical

Dans notre travail, on s'intéresse à un capteur chimique de type pH-ISFET à usage chimique de type micro-capteur ISFET (Ion Selective Field Effect Transistor micro-sensor). Nous présenterons donc brièvement les caractéristiques d'un tel

dispositif, avant de nous intéresser plus particulièrement aux équations qui régissent son fonctionnement, équations que nous essaierons de résoudre par la simulation numérique.

En effet, le point le plus important de notre projet fut de traiter des équations différentielles non linéaires et couplées. Cela signifie qu'il nous a été impossible de nous aider des méthodes habituelles de résolution des équations différentielles, c'est pourquoi nous avons dû envisager de transformer notre problème afin de pouvoir le résoudre par des méthodes bien connues, comme la méthode de Newton.

Ensuite, nous nous sommes attaqués à la manière de résoudre numériquement ce nouveau problème, par la programmation (avec Comsol) de multiples fonctions imbriquées, dont nous expliquerons l'intérêt par la suite.

Ce mémoire s'articulera autour de quatre grands axes:

Le premier chapitre est un travail de recherche bibliographique portant sur les capteurs chimiques de type ISFET tout en décrivant leur principe de fonctionnement, la détection du potentiel chimique et la détection du pH, nous traitons aussi des membranes ionosensibles.

Dans le deuxième chapitre nous avons étudié quelques méthodes et techniques de modélisation : méthodes analytiques, méthodes approximatives et les méthodes numériques telles que la méthode des différences finies et la méthode des éléments finis. Nous avons ensuite présenté l'outil de simulation COMSOL Multiphysics utilisé dans notre travail pour la résolution de systèmes d'équations non linéaires, en particulier le système d'équations bidimensionnel non linéaire Poisson-Boltzmann, et les équations de Navier-Stokes

Le troisième chapitre présente la méthodologie de développement de notre modèle numérique afin d'étudier et de modéliser la variation du potentiel de surface, l'activité des ions et la concentration des molécules dans l'électrolyte et des électrons dans le semiconducteur en fonction de la membrane utilisée et de la variation du potentiel chimique des ions d'hydrogène H^+ . Les résultats de modélisation seront présentés et interprétés dans ce chapitre.

Le dernier chapitre concerne l'implémentation du capteur ISFET sous forme d'un composant électronique dans la bibliothèque du simulateur Orcad-Pspice. Ceci permettra le test des performances du capteur dans un environnement électrique. Nous terminerons notre travail par une conclusion générale et les perspectives éventuelles à la continuation de notre travail de recherche.

CHAPITRE I

ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE
SUR LES CAPTEURS ISFETS

I. INTRODUCTION

Les instruments classiques d'analyse pour la détection d'une espèce (bio) chimique sont généralement complexes, coûteux, volumineux et souvent difficiles à mettre en œuvre. De plus, les phases de préparation des échantillons, d'incubation, et d'exploitation des résultats augmentent souvent très fortement la durée totale d'analyse.

Depuis des années, ces instruments font face à l'avènement des capteurs chimiques appelés plus couramment biocapteurs.

Les capteurs chimiques sont des dispositifs qui en général sont constitués d'une partie chimio-sélective permettant la reconnaissance chimique et d'un système transducteur transformant l'interaction chimique en signal électrique. Ils disposent aussi d'un environnement d'exploitation permettant le traitement électrique des signaux [2].

Le capteur chimique de type ISFET (Ion Sensitive Field Effect Transistor) est, en fait, un transistor MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) dont l'électrode de grille est remplacée par une combinaison d'une membrane sélective d'ions (ISE) dans une solution analytique et d'une électrode de référence

Pour mieux comprendre le principe de fonctionnement d'un l'ISFET, nous commençons d'abord par expliquer : le fonctionnement du transistor MOSFET. Ensuite nous étudions les différentes théories développées sur les capteurs ISFETs, le principe de fonctionnement physico-chimique et le principe de mesure. Pour finir nous citerons quelques couches sensibles pour différentes applications, ainsi que leurs principales caractéristiques.

II. LES CAPTEURS CHIMIQUES

Ces capteurs permettent la détection en continu des espèces ioniques en milieu liquide. Ils sont tous basés sur des méthodes de détection électrochimique et seront classés en trois catégories suivant le mode de détection : potentiométrique, ampérométrique, conductimétrique. Lors de notre présentation, l'accent sera mis sur le principe de reconnaissance ionique qui permet d'assurer la sélectivité de ces capteurs.

II.1. Les Capteurs Ampérométriques :

Dans un capteur ampérométrique, on procède à une électrolyse d'une espèce électroactive entre une électrode indicatrice et une électrode de référence.

L'ampérométrie est une technique qui repose sur la détermination de l'intensité de courant qui traverse une cellule électrochimique à un potentiel imposé. Elle est fonction de la concentration des corps électroactifs qui seront oxydés ou réduits à une électrode indicatrice, la seconde étant en général une électrode de référence. Il est donc possible, après étalonnage, de déterminer la concentration de certains corps présents, par la mesure de l'intensité (Fig.). Le courant mesuré dépend de la propriété des matériaux de détection, de la composition et de la géométrie des électrodes, de la concentration des espèces électroactives et des mécanismes de transport des espèces en phase liquide (migration, convection, diffusion) [3].

Les capteurs ampérométriques sont généralement des électrodes métalliques, des électrodes de carbone ou des électrodes modifiées chimiquement [4,5]. La plupart de ces capteurs sont souvent utilisés pour détecter l'oxygène (électrode de Clark), les sucres, les alcools, le phénol, etc. En général, ils sont caractérisés par une bonne sensibilité et rapidité. Par contre, les mesures sont sensibles à la température et possèdent une dérive temporelle.

L'ampérométrie est le mode le plus utilisé pour les biocapteurs enzymatiques [6]. De nombreux travaux se dirigent notamment vers l'amélioration de la sélectivité qui est liée à la modification de la surface d'électrode, la miniaturisation des capteurs (ultramicroélectrodes) et leurs intégrations dans des systèmes fluidiques.

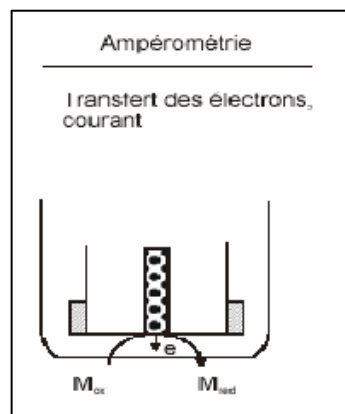


Fig.I- 1: Principe d'un capteur ampérométrique [2].

II.2. Les Capteurs Conductimétriques :

La conductimétrie est une technique électrochimique alternative à l'ampérométrie et à la potentiométrie [2]. Ces capteurs mesurent la conductance d'un électrolyte en immergeant dans la solution une cellule de mesure comprenant deux électrodes (Fig.I-5). La conductivité est mesurée soit à l'aide d'un pont Wheatstone, soit en courant alternatif (de fréquence appropriée) afin d'éviter la polarisation des électrodes [3,7]. En général, des électrodes

interdigitées sont largement utilisées pour ce type de capteurs. La mesure de conductance est considérée comme relativement non-sélective.

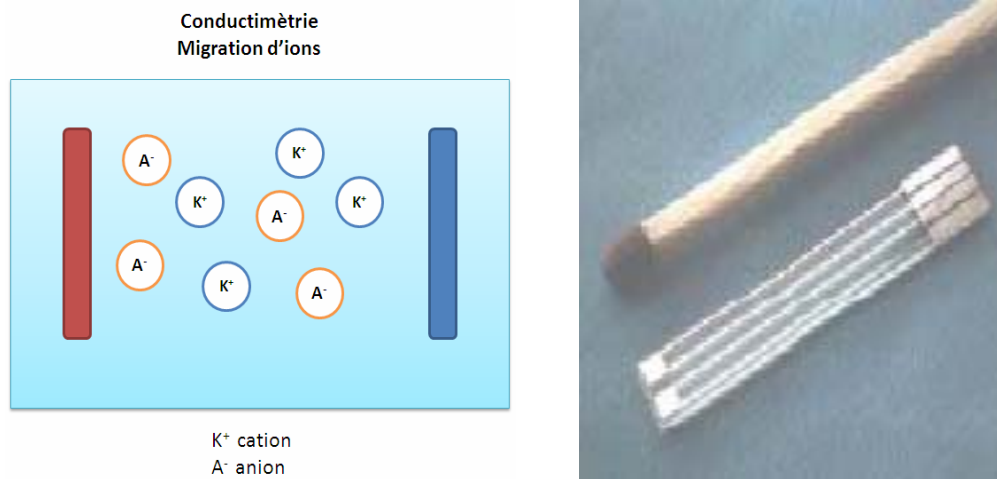


Fig.I- 2 : principe d'un capteur conductimétrique,
photo d'un capteur conductimétrique [2].

Cependant, de nombreux brevets récents montrent de nouvelles approches dans développement des biocapteurs conductimétriques notamment dans le domaine biomédical pour la détermination du glucose dans le sang et l'urine. Les capteurs conductimétriques sont caractérisés par leurs simplicités, leurs petites dimensions, mais la sensibilité et la sélectivité de ces capteurs sont à améliorer. Ils sont efficacement utilisés dans les systèmes d'analyse dit « à seuil ». K^+ A^-

II.3. Les capteurs Potentiométriques :

La potentiométrie est une méthode électrochimique basée sur la mesure de la différence de potentiel entre une électrode de mesure et une électrode de référence (Fig.I-4). La détermination des potentiels des électrodes permet de mesurer directement la concentration de l'analyte à doser. Dans ce type de système, un équilibre local est établi à la surface du capteur et conduit à la génération d'un potentiel proportionnel au logarithme de la concentration (activité) de l'échantillon selon la loi de Nernst [8].

Ce genre de capteur se sert d'une électrode de travail ou électrode à ion sélectif ou ISE (Ion Selective Electrode) sur laquelle est fixé un biorécepteur. Les ISEs ont un grand domaine

d'applications (détection des cations et anions des métaux, pH, pCl, pNO₃, pNH₄, pF, pPO₄, silice,...) dans de large gamme de concentration. Néanmoins, elles sont fragiles, relativement chères, non intégrables d'un point de vue monolithique. Elles ont enfin besoin de maintenances régulières et ont une résistance de sortie très élevée.

II.4. D'autre type de capteur

Nous pouvons citer plusieurs types capteurs chimique qui peuvent aussi faire l'objet d'une classification par :

- a) ***Les capteurs chimiques à base de fibres optiques*** : découvert dans les années 70 après le développement intensif des fibres optiques à bas coût. Cela a permis de commencer leur implémentation dans le domaine des capteurs y compris les capteurs chimiques. Baser essentiellement sur des récepteurs la partie principale du capteur est l'**optrode** qui sert d'indicateur de niveau de changement des propriétés optiques (absorption, fluorescence, intensité, réflexion, effet Raman,...) en solution. Grâce à leur faible poids, leurs petites dimensions et leur insensibilité aux interférences électromagnétiques ainsi d'une possibilité de mesure en une large gamme d'espèce chimique (pH, pCO₂, pNH₄, glucose, sodium, cation des métaux...), ces capteurs ont rapidement pris une place importante dans le rang des capteurs chimiques. Néanmoins, ils restent toujours coûteux par rapport aux capteurs traditionnels [9].



Fig.I- 3 : photo d'un capteur chimique à base de fibres optiques [10].

- b) ***Les capteurs de composition gazeuse*** dans ce genre de capteur nous pouvons aussi distinguer plusieurs types comme les capteurs à variation de résistance, les capteurs capacitifs et certain capteur ampérométrique et potentiométriques.

III. LE CAPTEUR CHIMIQUE ISFET

Le capteur ISFET (Ion Sensitive Field Effect Transistor) est issu du MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) qui est l'élément le plus important des circuits intégrés. C'est Piet Bergveld[1] qui, en 1970, a montré la sensibilité d'un MOSFET sans grille métallique aux ions H^+ , lorsque l'isolant en silice est directement en contact avec la solution.

III.1. Principe de fonctionnement

Pour mieux comprendre le principe de fonctionnement d'un l'ISFET, nous commençons d'abord par expliquer le fonctionnement du transistor MOSFET.

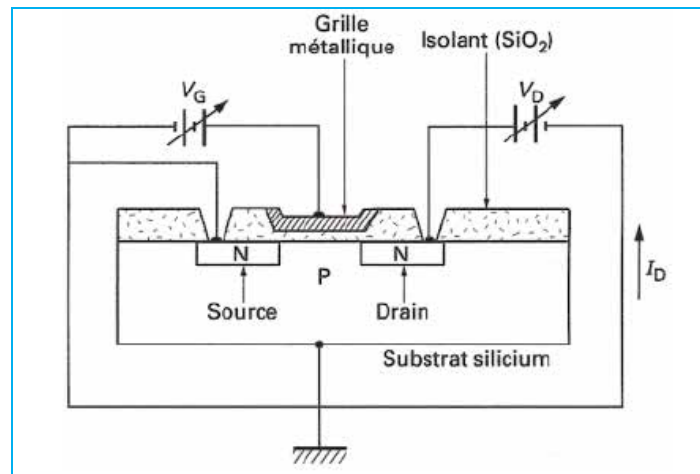


Figure I.4 : Schéma d'un transducteur MOSFET.[9]

Le transistor MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) consiste en un substrat semi-conducteur de type 'P' sur lequel repose une fine couche d'oxyde isolant (SiO_2), d'épaisseur t_{ox} . Une couche conductrice (métal ou polysilicium fortement dopé) appelée électrode de grille est aussi déposée sur l'oxyde. Enfin, deux régions fortement dopées 'N' de profondeurs X_j , appelées source et drain, sont formées dans le substrat de part et d'autre de la grille (figure I.4). La tension appliquée sur l'électrode de grille fait varier la conductance entre les deux régions source-drain ce qui fait varier le courant dans le canal situé en dessous. La source et le substrat dans le circuit électronique sont portés au même potentiel, en générale la masse [11].

Selon la valeur de la tension de grille V_g on peut définir plusieurs zones de fonctionnement

- 1) $V_g = 0$: le canal est saturé en porteurs majoritaires, les trous. Aucun courant ne peut

circuler entre la source et le drain

2) $0 < V_g < V_T$ (V_T = tension de seuil) – les trous sont repoussés vers le substrat.

C'est le régime de déplétion. Aucun courant ne peut circuler dans le canal entre la source et le drain.

3) $V_g > V_T$: les trous du substrat dans le canal seront repoussés pour laisser la place aux porteurs minoritaires, les électrons. Si maintenant le drain est porté à un potentiel V_d supérieur à celui de la source, alors les électrons s'écoulent de la source vers le drain en créant un courant de drain I_d .

La tension de seuil, V_T , est donnée par l'équation (I.1).

$$V_T = \frac{Q_M + Q_{si}}{q} + \frac{Q_b + Q_{ss} + Q_{ox}}{C_{ox}} + 2\phi_f \quad (I.1)$$

Où Q_M, Q_{si} représente le travail de sortie du métal et du semi-conducteur, respectivement,

ϕ_f est la différence de potentiel entre le niveau de Fermi E_F du silicium dopé et son niveau intrinsèque E_i , Q_b : est la charge de la couche de déplétion, Q_{ox} : présente la charge fixe dans l'isolant, Q_{ss} : est l'état de charge à l'interface semi-conducteur-oxyde de silice, C_{ox} : est la capacité de l'isolant de grille par unité de Surface .

Selon V_d , on distingue deux régimes de fonctionnement

1) $V_d < V_g - V_T$: le régime est dit linéaire, le courant de drain est donné par l'équation (I.2):

$$I_d = \mu C_{ox} \frac{W}{L} \left[(V_g - V_T) V_d - \frac{V_d^2}{2} \right] \quad (I.2)$$

Où μ : représentent la mobilité des électrons dans le canal, C_{ox} est la capacité de l'isolant, W et Z sont la largeur et la longueur du canal respectivement.

Puis, au fur à mesure que la tension de drain augmente, la densité des électrons dans la couche d'inversion diminue, l'épaisseur de la couche d'inversion se réduit à zéro, et la conductivité du canal va jusqu'à s'annuler au voisinage du drain. On parle de pincement (Pinch-off) du canal au niveau du drain [12]. Dans ce cas, la tension de drain $V_d = V_g - V_T$. La tension de drain et le courant de drain sont donc appelés tension de saturation et courant de saturation, respectivement (figure I.5)

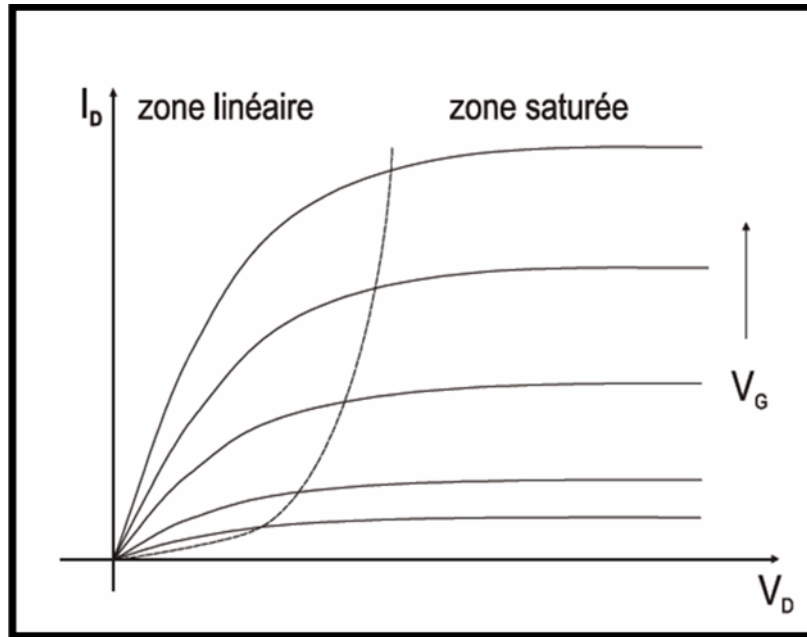


Figure I.5 : Variation du courant de drain en fonction
De la tension de drain V_d à tension de grille V_g constante [11].

2) $V_d > V_g - V_T$: lorsque la tension de drain augmente au-delà de la tension de saturation, le point de pincement se déplace vers la source et le courant de drain reste quasiment constant. Dans cette région, on est en régime dit de saturation, et l'expression du courant de drain est donnée par l'équation (I.3) :

$$I_D = \mu C_{ox} \frac{W}{2 \cdot L} (V_g - V_T)^2 \quad (I.3)$$

Où μ_n est la mobilité moyenne des électrons dans le canal.

La figure I.5 présente d'une façon différente la relation courant de drain-tension de grille. Lorsque la tension de grille est très petite par rapport à V_d ($V_d > V_g - V_T$), le courant de drain se situe dans la zone saturée. Puis, une augmentation de la tension de grille fait que le courant de drain devient linéaire ($V_d < V_g - V_T$).

Nous observons une dérive de la linéarité pour une forte tension de grille V_g . Celle-ci proviendrait d'une part de la modification de la mobilité des électrons dans le canal sous l'action d'un champ électrique important à la surface du semi-conducteur et d'autre part, une partie de la tension de drain appliquée ne se retrouve pas totalement aux bornes du canal, mais serait perdue aux bornes des résistances séries de la source et du drain.

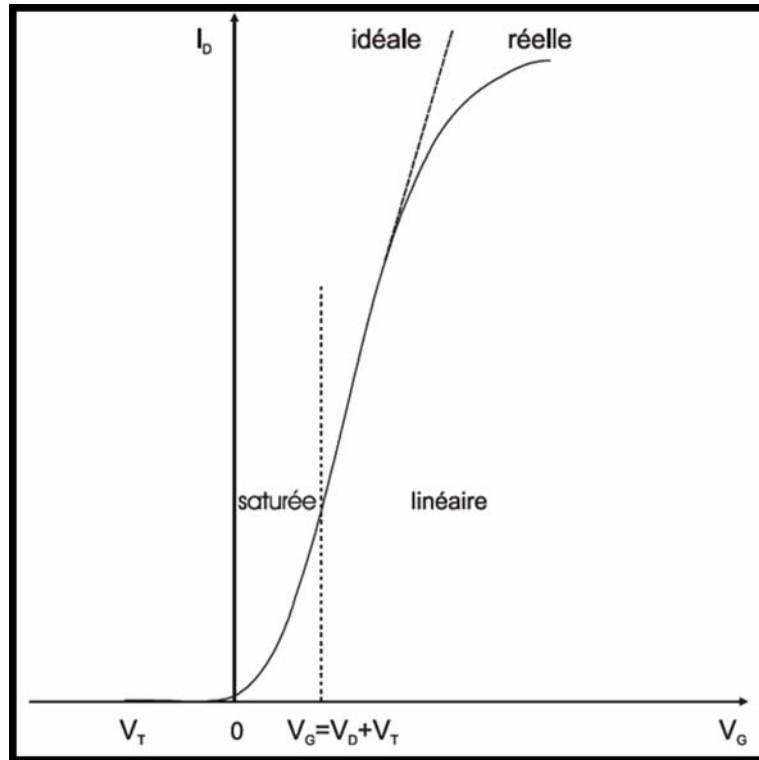


Figure I.6 : Variation du courant de drain I_D en fonction de la tension de grille V_g [11].

Dans le cas d'un ISFET nous travaillons dans le régime linéaire ce qui permet d'avoir des variations linéaires de (I_D) en fonction de la tension de grille V_g [6].

III.2. Le ChemFET (l'ISFET)

Le ChemFET (Chemical Field Effect Transistor) est un capteur potentiométrique qui est facilement adaptable pour une large gamme de mesures chimiques, biochimiques et biologiques application telles que: la micro fluidique, l'analyse "in vivo", la langue électronique, la culture de cellules [13].

III.2.1. Principe de fonctionnement des ChemFETs

En 1970, Piet Bergveld développa [1] un nouveau procédé électronique permettant de mesurer l'activité des ions dans un milieu chimique et biochimique. Il utilisa le principe d'une électrode de verre et d'un transistor à effet de champ. Il mit en évidence la sensibilité aux ions H^+ d'un transistor MOS (Métal-Oxyde-Semiconducteur) sans grille métallique. Il introduisit ainsi le premier capteur chimique (ChemFET) à effet de champ, l'ISFET (Ion Sensitive Field Effect Transistor) [14]. La méthodologie de l'ISFET pour la mesure d'ions est développée sur la base du transistor MOSFET (transistor à effet de champ commandé

en tension par une grille métallique). Le principe de base du transistor MOSFET est de pouvoir contrôler le courant circulant entre deux zones de semi-conducteur (source et drain) par l'application d'une tension V_{gs} sur la grille.

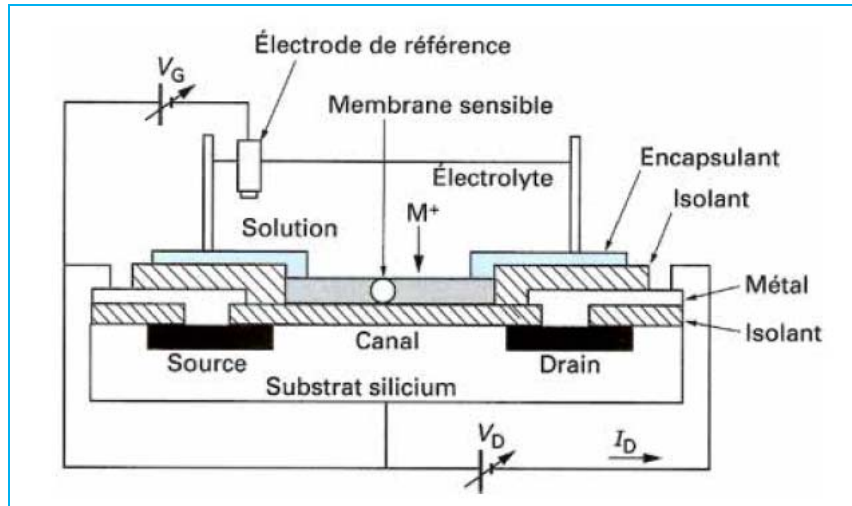


Figure I.7 : vue schématique d'un capteur ISFET [9]

L'électrode de grille métallique est isolée de drain et de la source au moyen d'un oxyde de silicium (SiO_2) et commande le courant drain source (I_{ds}) électro-statiquement. L'impédance d'entrée, extrêmement élevée de l'électrode de grille implique qu'il n'est pas nécessaire d'appliquer une grande tension d'entrée pour commander ce courant (I_{ds}). Dans ceci la grille métallique est remplacée par une électrode de référence, l'électrolyte à analyser et une grille isolante sensible à la concentration en ion recherché (par exemple H^+). Le système fondamental de mesure du pH-ISFET est montré sur la figure I.7.

Quand Bergveld [12] présenta pour la première fois le composant ISFET, celui-ci fonctionnait sans électrode de référence. Cependant, des travaux ultérieurs ont indiqué que les opérations propres à l'ISFET demandent la présence d'une électrode de référence pour établir un potentiel dans l'électrolyte en contact avec le substrat en silicium [15].

III.2.2. Principe physico-chimique de détection

L'équation (I.4) qui régit la tension de seuil d'un MOSFET est [3,15]:

$$V_T = \frac{Q_M}{q} - \frac{Q_{Si}}{q} - \frac{Q_D + Q_{SS} + Q_{OX}}{C_{OX}} + 2\phi_f \quad (\text{I.4})$$

Dans le cas de l'ISFET, le même procédé de fabrication est utilisé. Cependant des contributions supplémentaires se manifestent ; en effet l'électrode métallique de grille du MOSFET étant remplacée par une électrode de référence, l'électrolyte et la couche

chimiquement sensible, l'équation précédente devient [15] :

$$V_T = E_{ref} - \psi + \chi_{sol} - \frac{\Phi_{sl}}{q} - \frac{Q_{ox} + Q_{ss} + Q_D}{C_{ox}} + 2\phi_f \quad (I.5)$$

E_{ref} : représente le potentiel de l'électrode de référence,

ψ est le potentiel chimique fonction du pH et

χ_{sol} est un paramètre constant représentant le potentiel de surface du solvant.

Le principe de fonctionnement du capteur chimique ISFET est donc basé sur le piégeage d'ions au niveau de la couche sensible. Les charges piégées induisent une variation du potentiel chimique ψ et donc de la tension de seuil du transistor V_T .

III.2.3. La structure Electrolyte-Oxyde- Semi conducteur

Les structures métal-oxyde-semiconducteur (MOS) peuvent être caractérisées expérimentalement au moyen de la mesure de leur capacité en fonction de la tension appliquée. L'équation d'équilibre des charges dans toute la structure [16]. Il est possible d'étendre la même procédure au cas des structures EOS (Electrolyte-Oxyde- Semi conducteur).

Dans les structures EOS, la métallisation de grille a été remplacée dans les structures MOS par une solution électrolytique dont il est imposé un potentiel au moyen d'une électrode de référence. Cela introduit par rapport aux structures MOS deux nouvelles interfaces de type liquide-solide.

Afin d'éviter les confusions dans l'utilisation des définitions et des symboles propres à chaque matière, nous allons définir les différents potentiels utilisés par la suite.

Le potentiel électrochimique $\bar{\mu}$ est une quantité qu'il convient de décomposer en deux termes, l'une électrique ϕ et l'autre chimique μ donc on peut écrire le potentiel électrochimique sous la forme suivante :

$$\bar{\mu} = q\phi + \mu$$

Il est d'usage aussi, de distinguer deux sous-composantes électriques : le potentiel électrostatique ψ et le potentiel de surface χ :

$$\phi = \psi + \chi \quad (I.6)$$

En physique des solides, l'énergie est définie par rapport au niveau du vide, tandis que

dans une solution électrochimique, elle est donnée par rapport à l'électrode normale à l'hydrogène (ENH) [17].

IV. LA DOUBLE COUCHE ELECTRIQUE (EDL)

Lorsque deux phases de propriétés électrochimiques différentes sont amenées en contact, une redistribution de charge apparaît à l'interface, ce qui entraîne l'apparition d'une différence de potentiel (ddp). Cette redistribution de charge et cette ddp à l'interface sont caractéristiques des propriétés électrochimiques du système électrolyte-solide. La région de l'interface solide-liquide est appelée la double couche électrique, (Fig.I-12), le côté de la double couche situé dans la solution et qui est le plus près du solide est appelé couche interne, elle contient les molécules de solvants et certaines espèces (ions ou molécules) dont on dit qu'elles sont spécifiquement adsorbées. Cette couche interne est aussi appelée couche de Stern ou couche de HelmHotz [18]. Le lieu des centres électriques des ions spécifiquement adsorbés est appelé plan interne de HelmHotz (PIH), tandis que le lieu des centres des ions solvatés les plus proches du solide est appelé plan externe de HelmHotz. L'interaction des ions solvatés avec le solide met seulement en jeu des forces électrostatiques. Ces ions sont dits non spécifiquement adsorbés en raison de l'agitation thermique dans la solution. Les ions non spécifiquement adsorbés sont situés dans une région tridimensionnelle appelée couche *diffuse* qui s'étend du plan PEH jusqu'au sein de la solution.

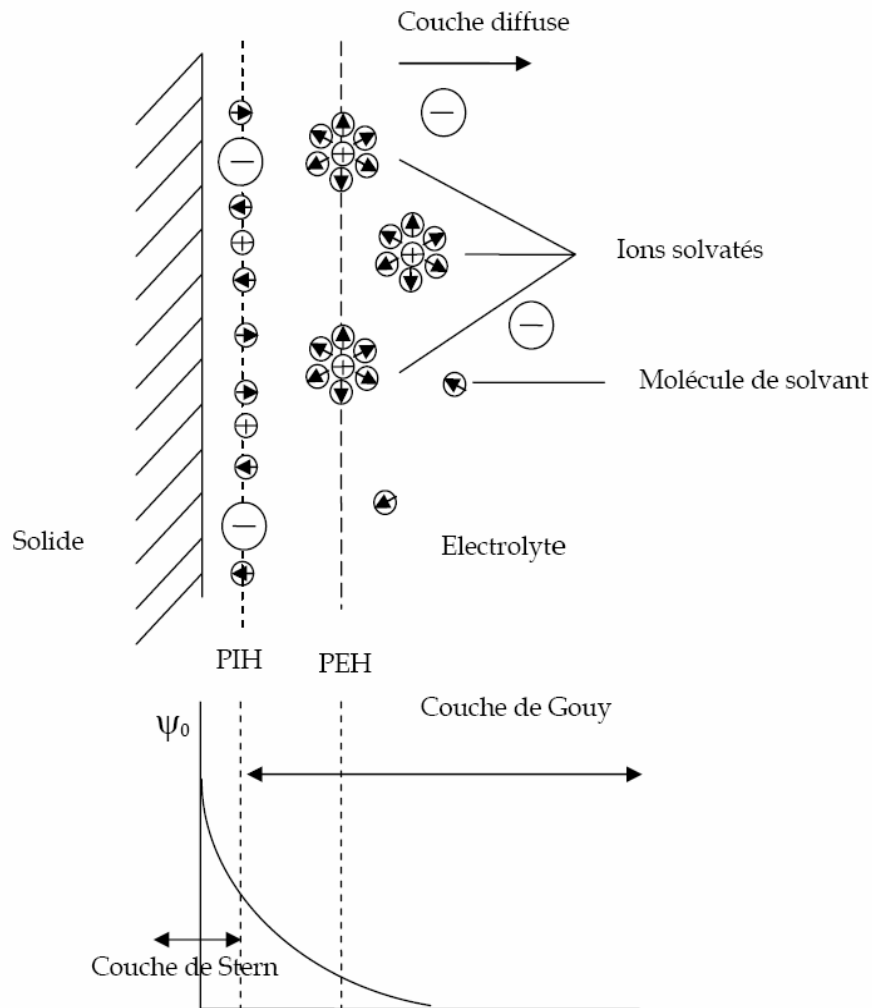


Figure I.8 : Représentation schématique de la double couche Électrique à l'interface solide-électrolyte [3,15].

IV.1. Théorie de la double couche diffuse

IV.1.1. L'équation de Poisson Boltzmann

Le but ici est de calculer le potentiel électrique ψ près de l'interface. En général, ce potentiel dépend de la distance normale à la surface x . Par conséquent, nous considérons une surface plane avec une densité de charge électrique σ , qui est en contact avec un liquide. La charge de surface génère un potentiel de surface $\psi_0 = \psi(x=0)$.

Quelle est la distribution du potentiel $\psi(x, y, z)$ dans la solution? En général, la densité de charge et le potentiel électrique sont liés par l'équation Poisson:

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{-\rho_e}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (I.7)$$

Ici, ρ_e est la densité locale de charge électrique par C/m^3 . Avec l'équation de Poisson, La distribution potentielle peut être calculée une fois que la distribution de charge exacte est connue. La complication dans notre cas est que les ions sont en solution libres pour se déplacer. Leur distribution spatiale est donnée par les statistiques Boltzmann. Selon l'équation de Boltzmann la densité locale d'ion est :

$$c_i = c_i^0 \cdot e^{-W_i/k_B T}$$

W_i : est le travail nécessaire pour former un ion dans la solution à une certaine distance de la surface ; C_i est la concentration de l'ion i .

Maintenant, nous prenons en compte seulement le travail électrique. On néglige par exemple, que l'ion doit déplacer d'autres molécules. Les travaux électriques nécessaires pour trouver un cation chargée dans une position avec un potentiel ψ est : $W_+ = e\psi$. Pour un anion $W_- = -e\psi$.

La concentration des anions et des cations C_+ et C_- sont en rapport avec le potentiel ψ par le facteur de Boltzmann: $c_- = c_0 \cdot e^{e\psi/k_B T}$ et $c_+ = c_0 \cdot e^{-e\psi/k_B T}$

Ici, C_0 est la concentration dans la solution. La densité de charge est

$$\rho_e = e(c^+ - c^-) = c_0 e \cdot \left(e^{-\frac{e\psi(x,y,z)}{k_B T}} - e^{\frac{e\psi(x,y,z)}{k_B T}} \right) \quad (I.8)$$

Pour vous rappeler que le potentiel dépend de la position que nous avons écrit explicitement $\psi(x, y, z)$. En substituant la densité de charge dans le Eq Poisson. (4,1) conduit à :

$$\nabla^2 \psi = \frac{c_0 e}{\epsilon_r \epsilon_0} \cdot \left(e^{\frac{e\psi(x,y,z)}{k_B T}} - e^{-\frac{e\psi(x,y,z)}{k_B T}} \right) \quad (I.9)$$

Souvent, cette équation est appelée l'équation de Poisson-Boltzmann. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles du second ordre, qui dans la plupart des cas doit être résolu numériquement. Seulement pour quelques géométries simples elle peut être résolue analytiquement.

Pour le cas simple d'un plan, le potentiel ne peut pas changer dans la direction Y et Z en raison de la symétrie et les coefficients différentiels par rapport à y et z doit être égal à zéro. Et l'équation de Poisson-Boltzmann ne contient que la coordonnée normale au plan x:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{C_0 e}{\epsilon \epsilon_0} \cdot \left(e^{\frac{e\psi}{k_B T}} - e^{-\frac{e\psi}{k_B T}} \right) \quad (I.10)$$

Cas particulier (faibles potentiels) $e|\psi| \ll k_B T$:

À la température ambiante et pour des faible potentiel $\psi \leq 25$ mV, même pour des potentiels plus élevés, jusqu'à 50-80 mV, nous pouvons étendre les fonctions exponentielle en une série et de ne garder que le premier terme (à savoir le terme linéaire) et de négliger l'autre :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{C_0 e}{\epsilon \epsilon_0} \cdot \left(1 + \frac{e\psi}{k_B T} - 1 + \frac{e\psi}{k_B T} + \dots \right) \approx \frac{2C_0 e^2}{\epsilon \epsilon_0 k_B T} \cdot \psi \quad (I.11)$$

Cela est parfois appelé "l'équation linéarisée de Poisson-Boltzmann". La solution générale de l'équation linéarisée de Poisson-Boltzmann est :

$$\psi(x) = C_1 \cdot e^{-Kx} + C_2 \cdot e^{Kx} \quad \text{Avec} \quad K = \sqrt{\frac{2C_0 e^2}{\epsilon \epsilon_0 k_B T}}$$

C_1 et C_2 sont des constantes, qui sont définis par les conditions aux limites. Les conditions aux limites exigent que, à la surface, le potentiel est égal au potentiel de surface, $\psi(x=0) = \psi_0$, et que, pour de grandes distances de la surface, le potentiel devrait être nul $\psi(x \rightarrow \infty) = 0$. Cette dernière mène directement à $C_2 = 0$. De la première condition nous obtenons $C_1 = \psi_0$. Par conséquent, le potentiel est donné par :

$$\psi(x) = \psi_0 \cdot e^{-Kx} \quad (I.12)$$

Le potentiel décroît de façon exponentielle. La longueur de décroissance est donnée par ce qu'on appelle la longueur de Debye : $\lambda_D = K^{-1}$. La longueur de Debye diminue avec l'augmentation de la concentration en sel. Cela est plausible, car plus y a d'ions dans solution, plus efficace est la projection de la charge de surface.

Jusqu'à présent nous avons supposé que nous ne traitons que les sels dits monovalents. Si des ions de valence plus élevée sont également présents, la longueur de Debye inverse est

donnée par :

$$K = \sqrt{\frac{e^2}{4\epsilon_0 k_B T} \sum_i c_i^0 Z_i^2}$$

Ici, Z_i est la valence de l'ion 'i'.

Dans de nombreux cas pratiques, nous pouvons utiliser l'hypothèse de faible potentiel et elle conduit à des résultats réalistes. Cependant, dans certains cas, nous avons un haut potentiel et nous ne pouvons linéariser l'équation de Poisson-Boltzmann. Maintenant, nous traitons la solution générale de l'équation unidimensionnelle de Poisson-Boltzmann et nous laissons tomber l'hypothèse de faibles potentiels.

On met $y \equiv e\psi / k_B T$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{e_0 e^y}{4\epsilon_0 k_B T} \cdot (e^y - e^{-y}) = \frac{2e_0 e^y}{4\epsilon_0 k_B T} \cdot \frac{1}{2} (e^y - e^{-y}) = K^2 \cdot \sinh y \quad (I.13)$$

Nous savons que $\sinh y = (e^y - e^{-y})/2$. Pour résoudre l'équation différentiel nous multiplions le tout par $2 \cdot dy / dx$:

$$2 \cdot \frac{dy}{dx} \cdot \frac{d^2 y}{dx^2} = 2 \cdot \frac{dy}{dx} \cdot K^2 \cdot \sinh y \quad (I.14)$$

Nous savons que :

$$\int \frac{d}{dx'} \left(\frac{dy}{dx'} \right)^2 dx' = 2K^2 \int \frac{dy}{dx'} \sinh y dx' \Leftrightarrow$$

$$\left(\frac{dy}{dx} \right)^2 = 2K^2 \int \sinh y' dy' = 2K^2 \cdot \cosh y + C_1 \quad (I.15)$$

C_1 est une constante d'intégration. Il est déterminé par les conditions aux limites. Pour de grandes distances de la surface, le potentiel y et sa dérivé dy/dx sont égaux à zéro. Alors $\cosh y = 1$ pour $y = 0$. Cette constante sera égale à : $C_1 = -2K^2$. il s'ensuit que :

$$\left(\frac{dy}{dx} \right)^2 = 2K^2 \cdot (\cosh y - 1) \Rightarrow \frac{dy}{dx} = -K \cdot \sqrt{2 \cosh y - 2} \quad (I.16)$$

en face de la racine carrée est un signe moins parce que y diminue pour un potentiel positif en augmentant la distance, c'est-à-dire que $y > 0 \Rightarrow dy/dx < 0$.

$$\sinh \frac{y}{2} = \sqrt{\frac{1}{2} (\cosh y - 1)} \quad (I.17)$$

L'intégration par partie donne :

$$\frac{dy}{\sinh \frac{y}{2}} = -2K \cdot dx \Rightarrow \int \frac{dy'}{\sinh \frac{y'}{2}} = -2K \cdot \int dx' \Rightarrow$$

$$2 \cdot \ln \left(\tanh \frac{y}{4} \right) = -2Kx + 2C_2$$

C_2 est une autre constante d'intégration. On obtient :

$$\ln \left(\frac{e^{y/4} - e^{-y/4}}{e^{y/4} + e^{-y/4}} \right) = -Kx + C_2 \quad (I.18)$$

On multiplie le tout par $e^{y/4}$, et on obtient :

$$\ln \left(\frac{e^{y/2} - 1}{e^{y/2} + 1} \right) = -Kx + C_2 \quad (I.19)$$

En utilisant le potentiel de surface sans dimension $y_0 = y(x=0) = q\psi_0/k_B T$ nous pouvons déterminer la constante d'intégration :

$$\ln \left(\frac{e^{y_0/2} - 1}{e^{y_0/2} + 1} \right) = C_2 \quad (I.20)$$

En substituant de l'équation précédente :

$$\ln \left(\frac{e^{y/2} - 1}{e^{y/2} + 1} \right) - \ln \left(\frac{e^{y_0/2} - 1}{e^{y_0/2} + 1} \right) = \ln \left(\frac{e^{y/2} - 1 + e^{y_0/2} - 1}{e^{y/2} + 1 + e^{y_0/2} + 1} \right) = -Kx$$

$$\Rightarrow e^{-Kx} = \left(\frac{e^{y/2} + 1 + e^{y_0/2} + 1}{e^{y/2} - 1 + e^{y_0/2} - 1} \right)$$

Résolution de l'équation de $e^{y/2}$ conduit à l'expression alternative :

$$e^{y/2} = \frac{e^{y_0/2} + 1 + (e^{y_0/2} - 1) \cdot e^{-Kx}}{e^{y_0/2} + 1 - (e^{y_0/2} - 1) \cdot e^{-Kx}} \quad (I.21)$$

IV.1.2. L'équation de Grahame

Un autre terme essentiellement important de connaître dans notre étude est la capacité de la double couche électrique. Pour cela nous devons savoir comment la charge de surface ' σ ' et le potentiel de surface Ψ_0 sont liés et ainsi calculer : $d\sigma/d\psi_0$.

Grahame a dérivée l'équation entre σ et Ψ_0 sur la base des théories de Gouy et Chapman. De la condition électro-neutralité on peut en déduire facilement cette équation. Cette condition exige que la charge totale, c'est à dire la charge de surface ainsi que la charge des ions dans la double couche, ensemble doit être égal à zéro. La charge totale de la double couche est $\int_0^\infty \rho_e dx$ et nous obtenons [18] :

$$\sigma = - \int_0^\infty \rho_e dx \quad (I.22)$$

En utilisant l'équation de Poisson à une dimension et le fait que, à grande distance du potentiel, et donc son gradient, sont nuls $dy/dx_{x=\infty} = 0$ on obtient :

$$\sigma = \varepsilon \varepsilon_0 \int_0^\infty \frac{d^2 \psi}{dx^2} \cdot dx = -\varepsilon \varepsilon_0 \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=0}$$

$$\text{Avec : } dy/dx = -2K \cdot \sinh(y/2) \text{ et } \frac{dy}{dx} = \frac{d(\varepsilon \psi / k_B T)}{dx} = \frac{e}{k_B T} \cdot \frac{d\psi}{dx}$$

Nous obtenons l'équation de Grahame :

$$\sigma = \sqrt{8 \varepsilon_0 \varepsilon k_B T} \cdot \sinh\left(\frac{e \psi_0}{2 k_B T}\right) \quad (I.23)$$

Pour de faibles potentiels, nous pouvons développer \sinh en une série ($\sinh x = x + x^3/3! + \dots$) et nous prenons en considération seulement le premier terme et on ignore le reste. Qui conduit à la relation simple :

$$\sigma = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 \psi_0}{\lambda_D} \quad (I.24)$$

IV.1.3. Capacité de la double couche électrique diffuse


Il est maintenant possible de calculer la capacité différentielle C_d de la couche diffuse. La capacité différentielle entre les deux régions séparées est, en général, défini comme dQ / dU . Ici, Q est la charge sur chaque "électrode" et U est la tension. La capacité d'une double couche électrique par unité de surface est donc :

$$C^A = \frac{d\sigma}{d\psi_0} = \sqrt{\frac{2e^2 \varepsilon_0 \varepsilon}{k_B T}} \cdot \cosh\left(\frac{e \psi_0}{2 k_B T}\right) = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\lambda_D} \cosh\left(\frac{e \psi_0}{2 k_B T}\right) \quad (I.25)$$

Rappelons juste que nous avons calculé la capacité dans le modèle de Gouy-Chapman. Nous étendons \cosh dans une série ($\cosh x = 1 + x^2 / 2! + x^4 / 4! + \dots$) Et ne considérer que le premier terme. Alors nous obtenons

$$C^A = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\lambda_D} \quad (I.26)$$

Il est instructif de comparer cela à une capacité d'un condensateur à plaques $\epsilon\epsilon_0 A/d$. Ici, A est la surface transversale et d est la séparation entre les deux plaques. Nous voyons que la double couche électrique se comporte comme un condensateur, dans lequel la distance entre les plaques est donnée par la longueur de Debye! La capacité d'une double couche - qui est la capacité de stockage libre- augmente avec l'augmentation de la concentration en sel en raison de la diminution de la longueur de Debye.

Pour éviter toute confusion, nous signalons que  défini ci-dessus est la capacité différentielle. La capacité intégrante par unité de surface est σ/ψ_0 . Expérimentalement, la capacité différentielle est plus facile à mesurer.

IV.2. Limitation de la théorie de Poisson Boltzmann

Dans l'étude de la double couche électrique diffuse, plusieurs hypothèses ont été faites qui conduisent à des imperfections [19]:

- La taille finie des ions a été négligée. En particulier, près de la surface, car la concentration en ions peut être très élevée. généralement la structure moléculaire détaillée devrait être prise en compte
- Les ions en solution ont été considérés comme une distribution de charge continue. Nous avons ignoré leur nature discrète, à savoir qu'ils ne peuvent être un multiple de l'unité de charge. En outre la charge de surface est supposée être homogène. En réalité, elle est formée par les différents ions adsorbés ou groupes chargés.
- Toutes les interactions non-Coulomb ont été écartées, par exemple la viscosité du solvant n'est pas prise en compte.
- Nous avons pris la permittivité du milieu pour être constant. En outre, la forte concentration des contre-ions dans la proximité de la surface peut changer radicalement la permittivité.
- Les surfaces sont supposées être plates sur l'échelle moléculaire.

Malgré ces fortes hypothèses, la théorie de Poisson-Boltzmann décrit des doubles couches électriques étonnamment bien. La raison en est que les erreurs conduisent à des effets opposés et se compensent.

En résumé: Pour les solutions aqueuses de la théorie de Gouy-Chapman fournit des prédictions relativement bonne pour les sels monovalents à des concentrations inférieures à 0,2 M et pour les potentiels au dessous de 50-80 mV. Le fait que la charge de surface, en

réalité, n'est pas continue, mais discrètement distribués, conduit, selon l'expérience, à des écarts seulement de charges bivalent et trivalent, cependant, les charges de surface ne se trouvent pas précisément dans un plan. Cela est vrai, par exemple, pour les membranes biologiques. Dans ce cas, de grandes déviations pourraient en résulter.

Heureusement, il existe une extension relativement simple semi-empirique de la théorie de Gouy-Chapman, qui représente la plupart des observations expérimentales. Cette extension a été proposée par Stern [18].

IV.3. La couche de Stern :

Stern combiné les idées de Helmholtz et celle d'une couche diffuse [18]. Dans la théorie de Stern nous prenons une approche pragmatique, bien que quelque peu artificielle, et divise la double couche en deux parties: une partie intérieure, la couche de Stern, et une partie extérieure, celle de Gouy ou la couche diffuse. Essentiellement, la couche de Stern est une couche d'ions qui est directement adsorbés à la surface et qui est immobile. En revanche, la couche de Gouy-Chapman se compose d'ions mobiles, qui obéissent à la statistique de Poisson-Boltzmann. Le potentiel au point où la couche de Stern se termine et la couche diffuse mobile commence sont liées, est appelé le potentiel zêta (ζ potentiels).

Les couches de Stern peuvent être introduites à différents niveaux de sophistication. Dans le cas le plus simple on ne considère que l'effet de taille finie des contre-ions (Fig. 4,5). En raison de leur taille, qui pourrait inclure dans l'eau d'hydratation leur coquille, ils ne peuvent pas rester infiniment proche de la surface, mais toujours à une certaine distance. Cette distance δ entre la surface et les centres de ces contre-ions marque le soi-disant plan extérieur de Helmholtz. Il sépare la couche de Stern de la couche de Gouy-Chapman. Pour une surface chargée positivement, cela est indiqué dans la Fig.

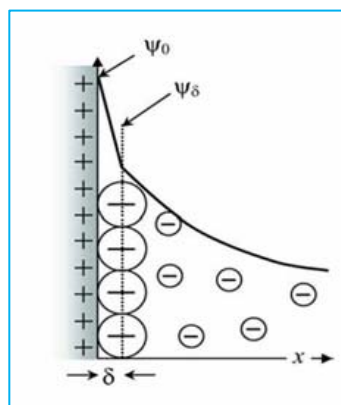


Fig I.9: vision simple de la couche de Stern

Au niveau suivant, nous prenons en considération également l'adsorption spécifique des ions (fig. 4.6). Les ions spécifiquement adsorbés liés étroitement à une distance courte. Cette distance est caractérisée le plan interne d'Helmholtz. En réalité tous les modèles peuvent seulement décrire certains aspects de la double couche électrique. Un bon modèle pour la structure de beaucoup de surfaces métalliques dans un milieu aqueux est montré dans fig.

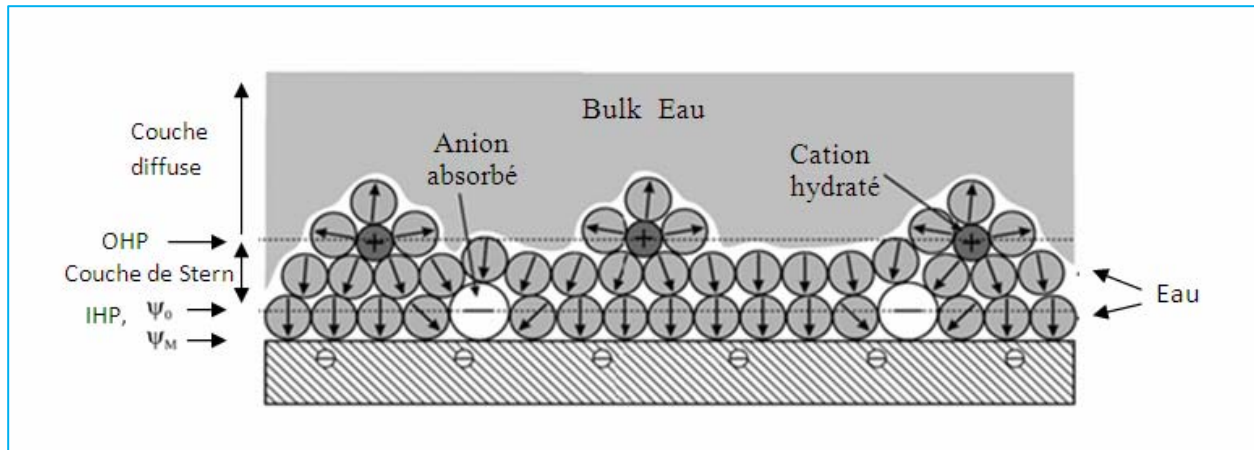


Figure I.10 : Figure I.5 : Distribution des espèces à l'interface-solide électrolyte, représentation du modèle de Gouy-Chapman-Stern [15].

La surface elle-même est négativement - chargée. Ceci peut être dû à un potentiel appliqué ou dû à la dissolution des cations en surface. Souvent les anions lient relativement fortement, et avec une certaine spécificité, sur certaines surfaces. Les molécules d'eau montrent une orientation préférentielle distincte et ainsi une constante (permittivité) diélectrique fortement réduite. Ils déterminent le plan interne d'Helmholtz. Vient après une couche de contre-ions non spécifiquement adsorbés avec leur coquille d'hydratation. Pourtant, la constante diélectrique est considérablement réduite parce que les molécules d'eau ne sont pas libres de tourner. Cette couche spécifie le plan externe d'Helmholtz. Enfin il y a la couche diffuse.

La couche de Stern. Le plan intérieur (PHI) et externe (OHP) d'Helmholtz sont indiqués. Dans la première couche d'eau liée primaire, la permittivité est généralement $\epsilon = 6$. Dans la couche secondaire de l'eau, il est de l'ordre de $\epsilon \approx 30$.

Une quantité importante dans l'expérimental est la capacité différentielle de la double couche électrique totale. Sur la photo Stern, elle est composée de deux condensateurs en série: la capacité de la couche de Stern, C_s et la capacité de la couche diffuse de Gouy-Chapman. La capacité totale par unité de surface est donnée par :

$$\frac{1}{C^A} = \frac{1}{C_{St}^A} + \frac{1}{C_{De}^A}$$

C_{St} est estimé à l'aide de l'équation simple pour un condensateur à plaques. Les deux plaques sont formées par la surface et par les ions adsorbés. En désignant le rayon des ions hydratés par r_{ion} , la distance est de l'ordre de $r_{ion} / 2 \approx 2\text{\AA}$. La capacité par unité de surface de la couche de Stern est : $C_{St}^A = 2\epsilon_{St}\epsilon_0 / r_{ion}$. La permittivité de la surface est réduite et généralement de l'ordre de $\epsilon_{St} \approx 6 \dots 32$ pour l'eau. En utilisant une valeur de $\epsilon_{St} = 10$, nous estimons une capacité pour la couche de Stern du $C_{St}^A = 0,44 \text{ Fm}^{-2} = 44 \mu\text{Fcm}^{-2}$. Les valeurs expérimentales sont généralement $10\text{-}100 \mu\text{Fcm}^{-2}$.

V. INTERFACE ELECTROLYTE /ISOLANT/SILICIUM (EIS)

Dans la pratique, la sensibilité au pH mesurée par un ISFET est inférieure à la valeur prédite par la loi de NERNST. Un phénomène chimique propre aux membranes sensibles formées à partir de couche de SiO_2 est responsable de cette dérive. Il n'y a plus d'équilibre thermodynamique entre les ions dans l'isolant et les ions dans l'électrolyte, par conséquent la loi de NERNST n'est plus applicable. La théorie du site-binding, inspirée des travaux de Bousse [17], explique le procédé qui se produit à l'interface isolant-électrolyte [3,15].

Ce modèle considère les groupes Si-OH sur la couche d'oxyde comme des centres actifs dont la charge varie proportionnellement aux ions présents à la surface de l'ISFET. Ces centres actifs sont responsables de la formation de la double couche électrique décrite par la théorie de GOUY-CHAPMAN-STERN [17] et donne le potentiel à l'interface oxyde-électrolyte (figure I.8).

Les ions H^+ et OH^- , présents dans une solution aqueuse sont appelés « ions déterminants le potentiel ». Ces ions sont responsables de l'état de charge à l'interface SiO_2 /électrolyte. Au contact de la solution aqueuse, des groupements de silanol (SiOH) se forment à la surface de l'isolant. Ces groupements peuvent être, suivant le pH de la solution, chargés positivement, chargés négativement ou neutres. Le pH particulier pour lequel la surface de la membrane a zéro charge est appelé « pH au point de charge nulle » pH_{pzc} . La présence de ces groupements de charges amène une correction à l'équation de NERNST habituellement utilisée en électrochimie.

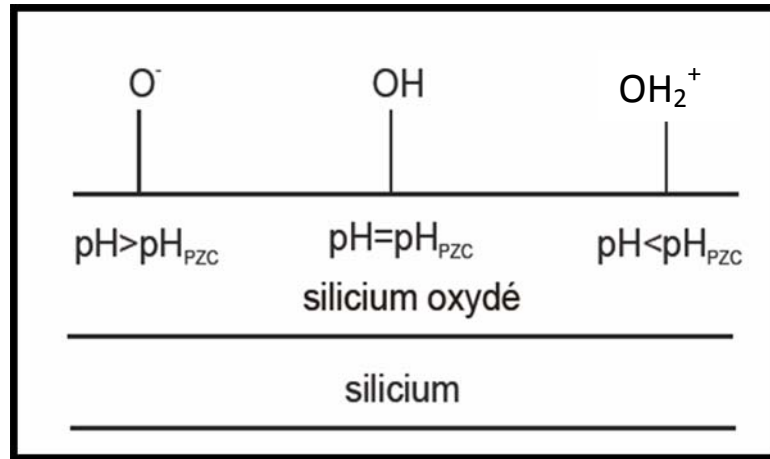


Figure I.11 : Présentation de l'interface Electrolyte/Isolant/Silicium (EIS) [11].

La figure I.11 illustre les trois différents types de groupements silanols à la surface d'une membrane.

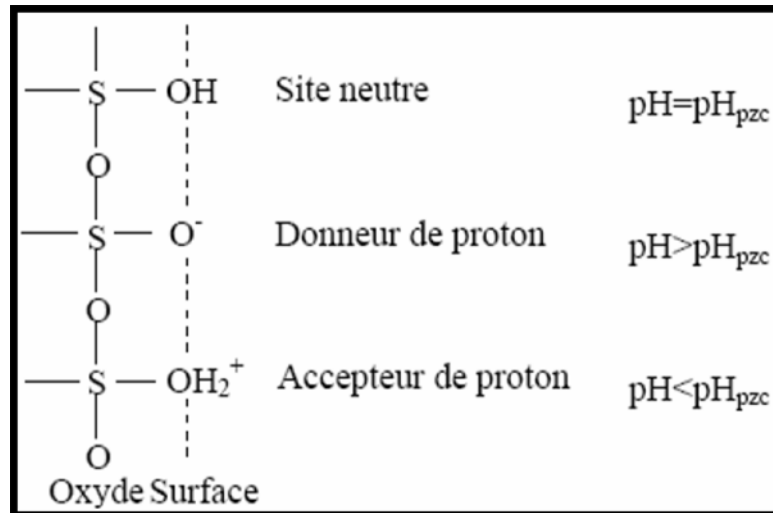
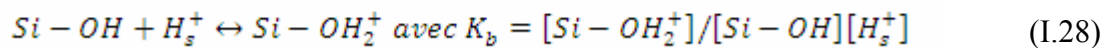
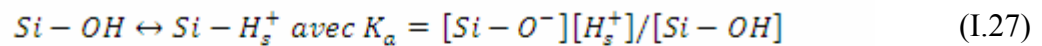


Figure I.12 : Représentation schématique de la théorie du site-binding [3].



Nous venons de parler de la structure de l'ISFET mais il reste toujours une question à résoudre 'comment mesurer la concentration de protons ou pH dans une solution en utilisant un ISFET?' Il y a, en fait, plusieurs théories permettant d'expliquer ce phénomène. Nous présenterons deux théories: celle de Nicolski et Eiseman [20] et celle de Siu et Cobbold [21].

Dans la première théorie dite d'échange d'ions, les auteurs ont utilisé une extension de l'équation de Nernst. Cette méthode est adaptée à des électrodes conventionnelles, en polymère ou en verre dont les membranes sont épaisses. En revanche elle semble moins bien adaptée au cas des ISFETs pour lesquels les membranes sont fines.

Sui et Cobbold [21] ont expliqué le mécanisme de réponse de l'ISFET en utilisant le modèle de liaison par sites ('sites binding theory'). Selon eux, la réponse de l'ISFET à la variation de pH n'est pas causée par la diffusion des ions hydrogène dans la couche isolante car cette diffusion nécessiterait beaucoup trop de temps (ordre de grandeur par secondes comme ce que étaient observées dans les électrodes conventionnelles) par rapport aux temps de réponse observés (millisecondes). A partir de cette observation, ils ont supposé que les réactions des protons et de la membrane inonosensible n'ont lieu qu'à l'interface oxyde – électrolyte.

En fait, il existe toujours des groupements (OH) à la surface de l'oxyde et ils agissent comme des sites amphotères (figure I.8) pour les réactions chimiques lorsqu'ils sont mis en contact avec un analyte. C'est-à-dire qu'ils peuvent être neutres, donneur de protons (propriété acide), ou accepteur de protons (basique). Ainsi, deux constantes d'équilibre K_a et K_b sont définies caractérisant l'acidité ou la basicité des sites (OH) (prenons le cas d'un ISE et SiO_2 comme exemple).

La manière la plus simple de calculer la relation reliant la différence de potentiel entre la surface de l'isolant et l'électrolyte (φ_0) et la charge de surface de l'isolant (σ_0) est d'utiliser les constantes d'équilibres k_a (constante d'acidité) et k_b (constante de basicité) des réactions de dissociation des sites hydroxyles amphotères, où $[H_s^+]$ représente la concentration en ions (H^+) à la surface de l'isolant et $[H^+]$ représente la concentration des ions (H^+) dans l'électrolyte. Comme dans l'équation (I.7), la distribution des ions hydrogène dans l'électrolyte peut être décrite par la statistique de Boltzmann :

$$[H_s^+] = [H^+] e^{-q\varphi_0/k_B T} \quad (I.29)$$

La théorie du site binding permet ainsi de montrer que :

$$[H_s^+] = \left(k_a / k_b \right)^{1/2} e^{(-q\varphi_0/k_B T)} F(\varphi_0) \quad (I.30)$$

En prenant le logarithme de l'équation précédente, on aboutit à :

$$pH = \log\left(\frac{k_a}{k_b}\right)^{1/2} - \frac{q\varphi_O}{k_B T (\ln 10)} - \log F(\varphi_O) \quad (I.31)$$

Ainsi, en isolant le potentiel φ_O , on obtient :

$$\frac{q\varphi_O}{kT} + G(\varphi_O) = \ln(10)(pH_{pzc} - pH) \quad (I.32)$$

Avec
$$pH_{pzc} = -1/2 \log\left(\frac{k_a}{k_b}\right) \quad (I.33)$$

L'étude complète permet également de montrer que [22] :

$$G(\varphi_O) = \arg Sh\left(\frac{q}{\beta k_B T} \varphi_O\right) \quad (I.34)$$

Avec :

$$\beta = \frac{2N_A q^2}{\left(\frac{k_a}{k_b}\right)^{1/2} \epsilon_D k_B T} \quad (I.35)$$

L'équation I.18 deviendra alors :

$$\frac{q\varphi_O}{kT} = \frac{\beta}{\beta+1} \ln(10)(pH_{pzc} - pH) \quad (I.36)$$

Ainsi, la sensibilité de l'ISFET sera définie par :

$$S = \left| \frac{d\varphi_O}{dpH} \right| \ln(10) \frac{k_B T}{q} \frac{\beta}{\beta+1} \quad (I.37)$$

Pour un bon nitrure ($\beta \gg 1$), à $T = 300^\circ K$, la sensibilité est Nernstienne ($S \approx 59 mV/pH$) [3]

VI. CONCLUSION

Les capteurs chimiques ChemFETs présentent une structure générique qui permet de concevoir sur la même puce un système de multi-capteurs selon leurs applications. D'autre part, les caractéristiques des capteurs (sensibilité et sélectivité) ne dépendent que des propriétés chimiques des couches ionosensibles. Si l'utilisation d'une électrode de référence ne permet pas leur intégration complète, des solutions, actuellement à l'étude, passent par la fabrication des microélectrodes de pseudo référence en faisant appel aux métaux nobles (or, platine).

Pour expliquer le fonctionnement de cette structure ISFET, la théorie du «Site-Binding» qui semble la seule théorie utilisée à l'heure actuelle a été présentée, ainsi

que le modèle de « *Gouy-Chapman-Stern* » qui décrit la distribution du potentiel dans la couche diffuse de l'interface solide / électrolyte.

La courbe de la sensibilité du micro-capteur ISFET montre une linéarité satisfaisante, tandis que, les caractéristiques de transfert I_{ds} (V_{gs}) présentent une non linéarité, ces caractéristiques non linéaires vont représenter le champ de l'utilisation des réseaux de neurones, d'une part, pour l'approximation de la réponse expérimentale, et d'autre part, pour la prédiction des nouvelles mesures de pH.

CHAPITRE II

LES METHODES NUMERIQUES

I. Introduction

Depuis plusieurs années maintenant, la simulation numérique est un des moteurs de l'innovation scientifique et industrielle. Une meilleure appréhension des phénomènes physiques et leur prise en compte en amont du processus de définition des produits ont abouti à l'amélioration des performances, de la durée de vie et des coûts. La prochaine frontière est la multiphysique : non seulement au niveau des outils, mais aussi pour les compétences et la formation.

En effet, maintenant on cherche toujours à étendre ses outils de modélisation vers des méthodes mathématiques plus proches de la théorie qui décrit la mécanique des milieux (du « réaliste » vers le « précis »), et ceci avec un souci de rapidité, de précision des calculs par rapport aux données expérimentales.

Un grand nombre de méthodes de modélisation a été développé, la plus simple est la modélisation analytique, seulement, très peu de cas peuvent être résolus exactement (analytiquement). A partir du début du siècle deux approches ont essayé d'obtenir une solution approchée via des méthodes numériques c'est-à-dire hors résolution analytique. La méthode directement issue des mathématiciens, les différences finies, essaye de réaliser les modèles les plus réalistes, avec le maximum d'effets afin de refléter au mieux la réalité, elle s'appuie sur des bases rigoureuses et la convergence vers la solution exacte est garantie. La méthode des éléments finis est issue des mécaniciens essaye d'avoir le meilleur compromis réalisme physique / temps de calcul, avec le souci d'interactivité. Cette méthode s'est développée d'une manière très intuitive à ses débuts et ne convergerait même pas vers la solution exacte. Les multiples corrections apportées à cette méthode ont fait d'elle une méthode incontournable dont on a pu montrer sa convergence dans de nombreux cas, mais d'un point de vue général le problème est encore ouvert.

Nous commencerons ce chapitre par un rappel sur les équations aux dérivées partielles et leurs méthodes de résolutions, et plus précisément la méthode des éléments finis, son principe de base pour la résolution des équations aux dérivées partielles, nous présenterons par la suite l'outil de simulation employé dans notre étude, ainsi que les différentes étapes de modélisation des problèmes physiques, et la résolution des EDP.

II. Equations aux dérivées partielles

II.1 Position du Problème

La résolution d'un problème aux dérivées partielles (par exemple un système d'équations différentielles du deuxième ordre et à deux dimensions) passe par plusieurs étapes.

La première consiste à déterminer les conditions aux limites du problème à résoudre, ensuite vient l'étape de la résolution qui se fait soit par des méthodes analytiques ou par des méthodes numériques ou bien par des méthodes semi-analytiques. La discrétisation du domaine de définition du problème à résoudre est une étape très importante, ainsi que les méthodes de linéarisations dans le cas des systèmes non linéaire à prendre en considération lors de la résolution du problème.

II.2 Expression des dérivées partielles

En mathématiques, la dérivée partielle d'une fonction est la dérivée par rapport à l'une de ses variables, les autres étant gardées constantes. Cette approche est utile dans l'analyse en dimension n , la géométrie différentielle, et l'analyse vectorielle.

La dérivée partielle par rapport à la variable x est notée $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)$ ou ∂f_x ou encore f_x .

Si f est une fonction de x_1, \dots, x_n et dx_1, \dots, dx_n sont les accroissements infinitésimaux de x_1, \dots, x_n respectivement, alors l'accroissement infinitésimal correspondant de f est:

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n} dx_n \quad (\text{II.1})$$

Si on suppose que le domaine de définition est discrétisé par la méthode des différences finies comme il est indiqué dans la figure I.1, alors la dérivée partielle est définie comme suit:

$$\begin{cases} f(x+h_1) = f(x) + h_1 \cdot f'(x) + \frac{h_1^2}{2!} \cdot f''(x) + \frac{h_1^3}{3!} \cdot f'''(x) + \dots + \frac{h_1^k}{k!} \cdot f^{(k)}(x) + \dots + \frac{h_1^n}{n!} \cdot f^{(n)}(x) \\ f(x-h_2) = f(x) - h_2 \cdot f'(x) + \frac{h_2^2}{2!} \cdot f''(x) - \frac{h_2^3}{3!} \cdot f'''(x) + \dots + (-1)^k \cdot \frac{h_2^k}{k!} \cdot f^{(k)}(x) \\ \quad + \dots + (-1)^n \cdot \frac{h_2^n}{n!} \cdot f^{(n)}(x) \end{cases}$$

Pour calculer $f_j^{(n)}$, on utilise les points situés de part et d'autre de x_j considérons les développements en séries de Taylor autour de x , de la fonction f

Posons $f_{i,j} = f(x_i, y_j) = f(M)$ où M est l'un des points de la figure II.1 ci-dessous:

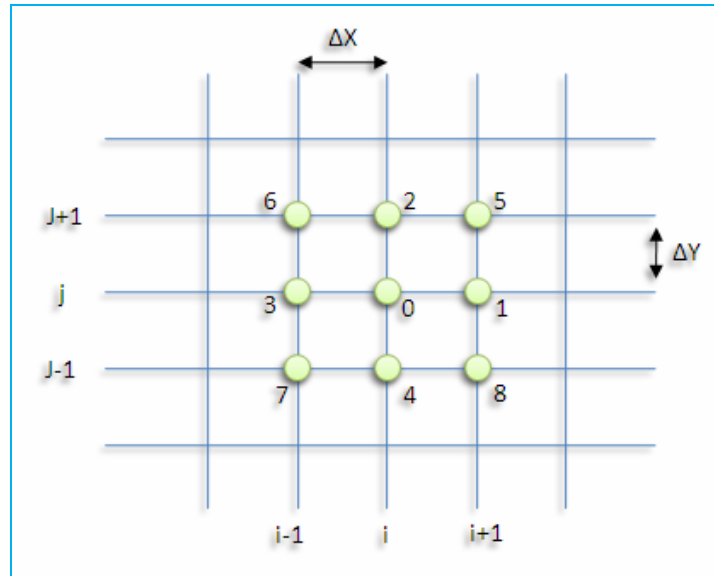


Figure II.1 Discretisation du domaine de définition en utilisant la Méthode des différences finies.

Pour $x = x_i$ et $y = y_j$, on obtient à partir du développement précédent à l'ordre 2 les dérivées

partielles premières :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

Soit :

$$f'_x(0) = \frac{f(1) - f(3)}{2\Delta x} \quad (\text{II.2})$$

On a également :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{i,j} = \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2\Delta y}$$

Soit :

$$f'_y(0) = \frac{f(2) - f(4)}{2\Delta y} \quad (\text{II.3})$$

En additionnant les développements en séries de Taylor des fonctions $f(x + h_1)$ et $f(x - h_1)$ à l'ordre 2, on obtient les dérivées partielles secondes :

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \cdot (f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}) \quad (\text{II.4})$$

Soit :

$$f''_x(0) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \cdot (f(1) - 2 \cdot f(0) + f(3))$$

On aura :

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}\right) = \frac{1}{(\Delta y)^2} \cdot (f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}) \quad (\text{II.5})$$

Soit :

$$f''_x(0) = \frac{1}{(2\Delta x)^2} \cdot (f(2) - 2 \cdot f(0) + f(4))$$

Pour l'obtention des dérivées croisées, $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ par exemple, on applique successivement les équations (II.1) et (II.2):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{1}{2\Delta x} (f_{i+1,j} - f_{i-1,j}) \quad (\text{II.6})$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{1}{\Delta y} \left(\frac{1}{2\Delta x} (f_{i+1,j} - f_{i-1,j}) \right) = \frac{1}{2\Delta x} \left(\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{i+1,j} - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{i-1,j} \right) \quad (\text{II.7})$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{1}{2\Delta y} (f_{i+1,j+1} - f_{i+1,j-1}) - \frac{1}{2\Delta y} (f_{i-1,j+1} - f_{i-1,j-1}) \right) \quad (\text{II.8})$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left((f_{i+1,j+1} - f_{i+1,j-1}) - (f_{i-1,j+1} - f_{i-1,j-1}) \right) \quad (\text{II.9})$$

Soit :

$$f''_{xy}(0) = \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \cdot (f(5) - f(8) - f(6) - f(7))$$

II.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont les valeurs que prennent les solutions des équations aux dérivées ordinaires et des équations aux dérivées partielles sur une frontière. Il existe un grand nombre de conditions aux limites possibles, en fonction de la formulation du problème, du nombre de variables en jeu, et (de manière plus importante) de la nature de l'équation. Les conditions imposées au temps $t = 0$ sont appelées « conditions initiales ». On peut aussi imposer des conditions aux limites, par exemple, dans la limite pour $t \rightarrow \infty$. Dans l'exemple physique d'une corde vibrante attachée aux deux extrémités, les conditions aux limites prennent la forme : « quel que soit le temps t , le déplacement des points extrémaux est nul ».

Les conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann sont utilisées pour les équations différentielles partielles elliptiques, telles que l'équation de Poisson-Boltzmann [23].

II.3.1. Les conditions aux limites de Dirichlet

Une condition aux limites de Dirichlet est imposée à une équation différentielle ou à une équation aux dérivées partielles lorsque l'on spécifie les valeurs que la solution doit vérifier sur les frontières/limites du domaine. Dans le cas d'une équation différentielle telle que l'équation de Poisson:

$$\frac{\delta^2 \varphi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 \varphi}{\delta y^2} = \frac{q(N_A + n(x,y))}{\varepsilon} \quad (\text{II.10})$$

Les conditions aux limites de Dirichlet dans le cas d'un transistor MOSFET sont données comme suit:

$$\varphi_F(0, y) = V_{bi} \quad (\text{II.11})$$

$$\varphi_F(L, y) = V_{ds} + V_{bi} \quad (\text{II.12})$$

II.3.2. Les conditions aux limites de Neumann

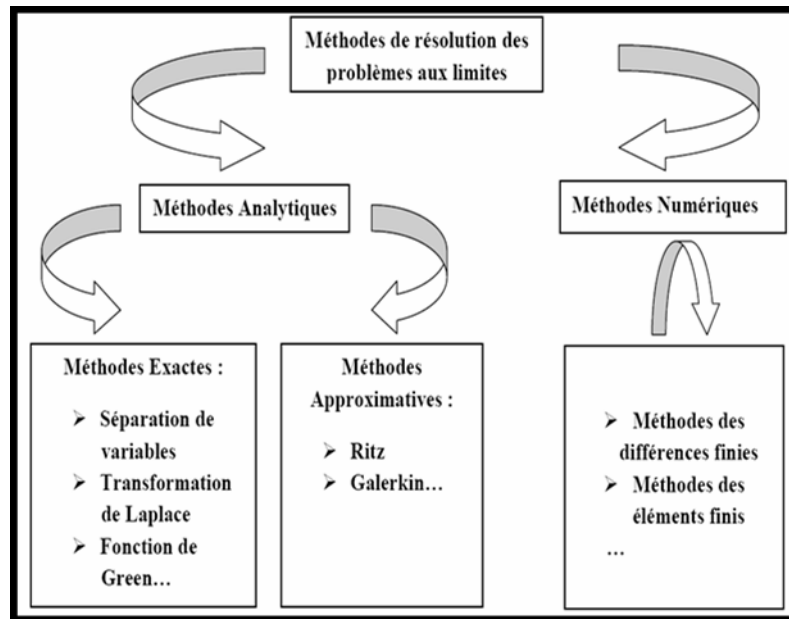
Une condition aux limites de Neumann (nommée d'après Carl Neumann) [23] est imposée à une équation différentielle ou à une équation aux dérivées partielles lorsque l'on spécifie les dérivées des valeurs que la solution doit vérifier sur les frontières/limites du domaine.

Dans le cas d'une équation différentielle telle que l'équation de Poisson d'un transistor MOSFET. Les conditions de Neumann sont données comme suit:

$$\varepsilon_{ox} \frac{V_{Feff} - \varphi(x,y)}{t_{ox}} = \varepsilon_{si} \frac{\partial \varphi(x,y)}{\partial y} \Big| = Q_s \quad (\text{II.13})$$

III. RESOLUTION DE PROBLEME AUX DERIVES PARTIELLES

Dans ce paragraphe, nous exposons quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites décrivant des phénomènes physiques. Ces méthodes se rangent dans l'une des classes indiquées par la figure (II.2).



Figure

II.2

Méthodes de résolution des problèmes aux limites.

III.1 Méthode de séparation de variables

La méthode de séparation de variables est une technique fondamentale pour résoudre analytiquement des équations aux dérivées partielles linéaires [24]. Elle consiste à :

- Transformer l'équation aux dérivées partielles à résoudre en une paire d'équations différentielles ordinaires, en supposant la solution cherchée ϕ est de la forme $F(x)G(y)$ dans le cas des problèmes statiques ou $F(x) H(y) G(t)$ dans le cas de problèmes d'évolution.
- Résoudre la paire d'équations différentielles ordinaires trouvées dans l'étape précédente, en tenant compte des conditions aux limites et initiales.
- Ajouter les solutions trouvées dans l'étape précédente pour obtenir la solution générale de l'équation aux dérivées partielles linéaire.

III.1.1. Méthode de la transformation de Laplace

La méthode de la transformation de Laplace consiste à [25]:

- Transformer un problème aux dérivées partielles ou ordinaires en un problème aux dérivées ordinaires ou en un problème algébrique respectivement, en appliquant l'opérateur de la transformation de Laplace à l'équation différentielle à résoudre.
- Résoudre le problème transformé.
- Appliquer la transformation inverse de Laplace à la solution trouvée dans l'étape précédente pour obtenir la solution du problème initiale.

III.1.2. Méthode de Green

Considérons le problème aux limites (II.10) où ϕ une fonction définie et suffisamment dérivable sur Ω vérifiant :

$$L(\phi) - f = 0 \quad \text{sur } \Omega \quad (\text{II.14})$$

$$\phi(p) = h(p) \quad \text{sur } \Gamma_1 \text{ une partie de la fonction de } \Omega \quad (\text{II.15})$$

$$B(\phi) = g(p) \quad \text{sur } \Gamma_2 = \Omega - \Gamma_1$$

L et B sont des opérateurs différentiels.

Dans le cas où L est un opérateur linéaire. La résolution de ce problème par la méthode de Green se fait de la manière suivante [26]:

- Déterminer l'opérateur adjoint L^* de L
- Déterminer la fonction G vérifiant :

$$L^*G = \delta(\xi_1 - x_1, \xi_2 - x_2, \dots, \xi_n - x_n) \quad (\text{II.16})$$

Et des conditions aux limites appropriées, où L est la fonction de Dirac et $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ sont les coordonnées du point source. La fonction G ainsi obtenue est appelée fonction de Green.

- Construire la solution du problème initial, en utilisant la formule:

$$\phi(x_1, \dots, x_n) = \int \dots \int G(\xi_1 - x_1, \dots, \xi_n - x_n) f(\xi_1, \dots, \xi_n) d\xi_1 \dots d\xi_n \quad (\text{II.17})$$

L'inconvénient de cette méthode est que la construction de la fonction de Green est difficile.

III.2 Méthodes Approximatives

Le plus souvent, les problèmes d'intérêt pratique sont régis par des équations aux dérivées partielles ou ordinaires difficiles à résoudre par les méthodes analytiques. Ces difficultés sont dues à l'irrégularité des domaines, les coefficients sont variables, les conditions aux limites ne sont pas appropriées, interfaces, etc. Pour surmonter cette difficulté, les méthodes approximatives s'avèrent nécessaires pour la résolution de ce type d'équations.

Dans ce qui suit, nous allons examiner la méthode de Ritz.

La méthode de Ritz repose sur la supposition que la solution du problème aux limites (II.10) est celle qui minimise une certaine fonctionnelle $I(\phi)$, si elle existe. La solution du problème est celle qui minimise la fonctionnelle suivante [27]:

$$I(\phi) = \frac{1}{2} \langle L(\phi), \phi \rangle - \langle f, \phi \rangle \quad (\text{II.18})$$

Assumons que la solution cherchée du problème aux limites peut être approximée par:

$$\phi = \sum_{i=0}^n c_i \Psi_i = \{c\}^T \{\Psi\} = \{\Psi\}^T \{c\} \quad (\text{II.19})$$

Où les Ψ_i sont définies sur tout le domaine d'étude Ω et sont linéairement indépendantes et vérifiant les mêmes conditions aux limites que la solution exacte du problème (II.10), les c_i sont des coefficients à déterminer et $\{.\}$ et $\{.\}^T$ désignent respectivement un vecteur de colonne et un vecteur de ligne.

Substituons (II.19) dans (II.18), nous obtenons :

$$I(c_1, c_2, \dots, c_n) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{\Psi\} L \{\Psi\}^T d\Omega \{c\} - \{c\}^T \int_{\Omega} \{\Psi\} f d\Omega \quad (\text{II.20})$$

Les c_i rendant minimale la fonctionnelle (II.19) doivent vérifier:

$$\frac{\partial I(c_1, c_2, \dots, c_n)}{\partial c_i} = 0 \quad ; i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{II.21})$$

Dérivons (II.21) par rapport aux c_i , $i=1,2,\dots,n$ et tenons compte de (II.18), nous obtenons:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(c_1, c_2, \dots, c_n)}{\partial c_i} &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{\Psi\} L \{\Psi\}^T d\Omega \{c\} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{\Psi\} L \Psi_i d\Omega - \int_{\Omega} \Psi_i f d\Omega \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=0}^n c_j \int_{\Omega} (\Psi_i L \Psi_j + \Psi_j L \Psi_i) d\Omega - \int_{\Omega} \Psi_i f d\Omega \end{aligned}$$

De (II.16) et (II.17) nous obtenons le système suivant:

$$\frac{1}{2} \sum_{j=0}^n c_j \int_{\Omega} (\Psi_i L \Psi_j + \Psi_j L \Psi_i) d\Omega - \int_{\Omega} \Psi_i f d\Omega = 0 \quad (\text{II.23})$$

Sous forme matricielle (II.23) s'écrit:

$$[s][c] = [b] \quad (\text{II.24})$$

Où les éléments S_{ij} sont donnés par:

$$s_{ij} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\Psi_i L \Psi_j + \Psi_j L \Psi_i) d\Omega \quad (\text{II.25})$$

Et les éléments de $[b]$ sont donnés par:

$$b_i = \int_{\Omega} \Psi_i f d\Omega \quad (\text{II.26})$$

Donc une solution approximative de (II. 15) est obtenue en résolvant (II.24).

III.3. Méthodes numériques

handicape des méthodes d'approximation est qu'elles n'offrent pas un moyen pour construire les fonctions de base Ψ_i avec $i = 1, 2, \dots, n$. Un mauvais choix de ces fonctions peut:

- Augmenter le volume de calcul.
- Engendrer un système mal conditionné.

L'amélioration de la précision ne peut se faire sans augmenter le nombre de fonctions de base. Pour remédier à ces problèmes, nous proposons deux méthodes numériques : méthode des différences finies et méthode des éléments finis.

III.3.1. Méthode des différences finies

La méthode des différences finies transforme un problème continu en un problème discret facile à résoudre [29]. Elle consiste à:

- 1) Etablir un maillage du domaine $[0, L_x] \times [0, L_y]$ dont les nœuds sont les points $(x_i, y_j) = (i\Delta x, j\Delta y)$, $i=0, 1, \dots, M+1$.

Où N et M sont deux entiers positifs, $\Delta x = \frac{L_x}{N+1}$ et $\Delta y = \frac{L_y}{M+1}$. Dans le cas où $\Delta x = \Delta y$ on dit que le maillage est uniforme.[11]

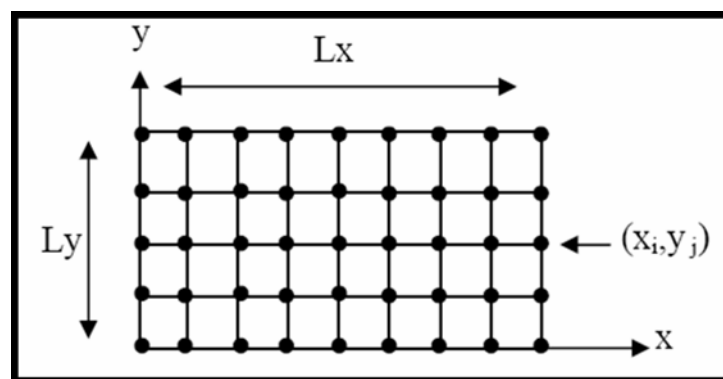


Figure II.3 Maillage du domaine d'étude.

- 2) Obtenir une expression approchée L_h de l'opérateur L aux nœuds en remplaçant les dérivés partiels par des rapports aux différences finies appropriés. A titre d'exemple,

une approximation du Laplacien fait intervenir cinq noeuds comme il est indiqué dans la figure II.4.

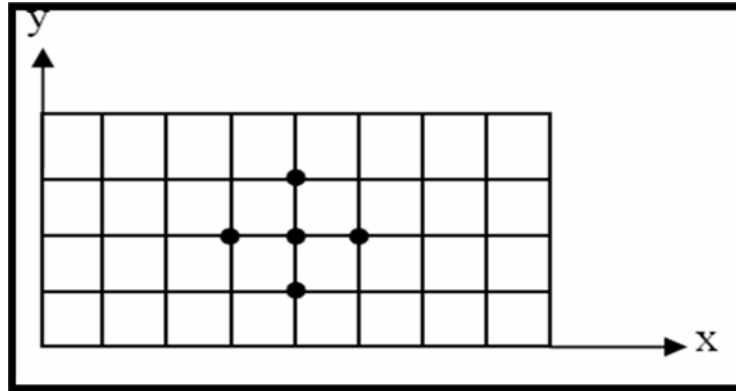


Figure II.4 Nœud intervenant dans l'approximation du Laplacien.

- 3) Trouver les $w_{i,j}$ tels que : $L_h w_{i,j} = f(x_i, y_j)$, $i=1, 2, \dots, M$.
- 4) Les $w_{i,j}$ ainsi obtenus constituent la solution approximative de la solution exacte ϕ aux points $(x_i, y_j) = (i\Delta x, j\Delta y)$ du problème.

III.3.2 Méthode des éléments finis

a. Principe de la méthode

La méthode des éléments finis est fondamentalement un cas spécial des formulations intégrales. En effet, chacune des méthodes utilise une base de fonctions comme point de départ pour obtenir une solution approximative.

La grande différence réside dans le choix de la base de fonctions, dans les formulations intégrales ces fonctions de base sont définies sur le domaine tout entier, tandis que la méthode des éléments finis se base sur l'une de ces formulations appliquée à des domaines locaux discrets qui sont habituellement simples, par rapport au domaine global. Ces domaines locaux discrets sont appelés éléments. C'est pourquoi le nom de la méthode.

L'objectif de ce paragraphe est de présenter le principe de base de la méthode des Éléments finis.

b. Etapes de base de la méthode des éléments finis

Le principe de la méthode des éléments finis est d'approximer un problème continu par un problème discret facile à résoudre, en remplaçant le domaine d'étude continu par un nombre d'éléments de forme géométrique simple, sur chacun de ces éléments, la fonction inconnue est approximée par une combinaison linéaire de fonctions simples qui sont

généralement des polynômes. En appliquant l'une des formulations intégrales et finalement en résolvant le système d'équations ainsi obtenu, nous obtenons une solution approximative de la solution exacte du problème aux limites. Donc, la résolution d'un problème aux limites par la méthode des éléments finis est constituée des étapes suivantes :

1. Discrétisation du domaine continue en sous domaines ;
2. Construction de l'approximation nodale ;
3. Calcul des matrices élémentaires correspondant à la formulation intégrale ;
4. Assemblage des matrices élémentaires et prises en compte des conditions aux limites ;
5. Résolution du système d'équations.

c. Discrétisation du domaine

La discrétisation du domaine d'étude Ω est la première et peut être la plus importante étape dans une analyse par éléments finis parce que la manière selon laquelle le domaine est discrétisé influe sur l'espace mémoire, le temps de calcul et la précision de calcul.

Dans cette étape, le domaine Ω tout entier est divisé en un nombre de sous domaines $\Omega_{(e)}$, ($e = 1, 2, 3, \dots, N_e$), où N_e est le nombre de sous domaines, ces domaines sont appelés éléments et pouvant prendre différentes formes, selon que le domaine est unidimensionnel, bidimensionnel, ou tridimensionnel. En plus il ne doit y avoir ni recouvrement ni trou entre deux éléments ayant une frontière commune.

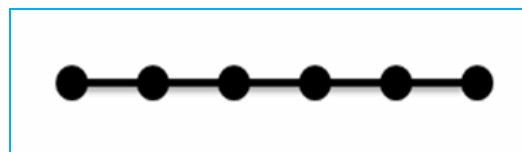


Figure II.5 Discrétisation d'un segment de droite.

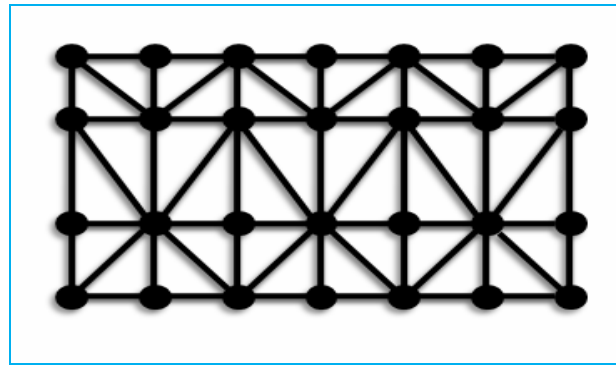


Figure II.6 Discretisation d'un domaine rectangulaire.

d. Approximation par éléments finis

La seconde étape dans une analyse par éléments finis et qui est aussi d'une grande importance consiste à définir, sur chaque élément fini, des fonctions d'interpolation (de forme), $\psi_1^{(e)}, \psi_2^{(e)}, \dots, \psi_n^{(e)}$, telles que :

1. La fonction inconnue $\phi^{(e)}$ soit approchée par une combinaison linéaire de cette fonction d'interpolation :

$$\phi^{(e)} \approx \tilde{\phi}^{(e)} = \sum_{i=1}^n \phi_i^{(e)} \psi_i^{(e)} = \{\phi^{(e)}\}^T \{\psi^{(e)}\} = \{\psi^{(e)}\}^T \{\phi^{(e)}\} \quad (\text{II.27})$$

Où n est le nombre de nœuds dans un élément, $\phi_i^{(e)}$ les valeurs de ϕ aux nœuds de l'élément considéré, $\{\phi^{(e)}\}$ et $\{\psi^{(e)}\}^T$ sont respectivement des vecteurs colonnes et lignes des $\psi_i^{(e)}$. Dans ce cas, (II.10) est dite approximation nodale.

2. La fonction $\tilde{\phi}^{(e)}$ prend, aux nœuds de l'élément, les mêmes valeurs que la fonction inconnue $\phi^{(e)}$ et qu'on appelle valeurs nodales.
3. Les fonctions $\tilde{\phi}^{(e)}$ doivent être continues sur les éléments correspondant.
4. Les fonctions $\tilde{\phi}^{(e)}$ doivent satisfaire des conditions de continuités sur les frontières entre éléments.

La fonction $\tilde{\phi}^{(e)}$ ainsi construite est appelée fonction d'approximation

e. Construction des fonctions d'interpolation

Dans ce qui suit, nous donnons une méthode systématique pour construire les fonctions d'interpolation (forme): $\psi_1^{(e)}, \psi_2^{(e)}, \dots, \psi_n^{(e)}$.

L'approximation nodale (II.27) est construite à partir d'une approximation générale:

$$\{\Phi^{(e)}(M)\} = \{P(M)\}^T \{a\}, \quad \forall M \in \Omega^{(e)} \quad (\text{II.28})$$

Où :

$\{P(M)\}^T$ est un vecteur ligne dont les composantes $P_i(M), i = 1, 2, \dots, n$ sont connues et constituent une base, en générale polynomiale.

$\{a\}$ Vecteur colonne des paramètres de l'approximation (paramètres généralisés), ils n'ont pas de signification physique. En évaluant (II.28) aux nœuds $M_i (i = 1, 2, \dots, n)$ et supposant que :

$\{\Phi^{(e)}(M_i)\} = \{\Phi_i^{(e)}\}, i = 1, 2, \dots, n$, Nous obtenons :

$$\{\Phi^{(e)}\} = [T]\{a\} \quad (\text{II.29})$$

Où :

$$[T] = \begin{bmatrix} P_1(M_1) & \dots & P_n(M_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ P_1(M_n) & \dots & P_n(M_n) \end{bmatrix} : \text{est une matrice de type } n \times n.$$

En multiplions (II.29) par l'inverse $[T]^{-1}$ de la matrice $[T]$, nous obtenons le vecteur $\{a\}$ des paramètres généralisés :

Où :

$$\{a\} = [T]^{-1}\{\Phi^{(e)}\} \quad (\text{II.30})$$

$\{\Phi^{(e)}\}$ est un vecteur colonne dont les composants sont les valeurs nodales de la fonction inconnue de Φ aux nœuds. En portant (II.30) dans l'expression de l'approximation (II.28) et tenant compte de (II.27) nous obtenons le vecteur de ligne des fonctions d'interpolation $\Psi_1^{(e)}, \Psi_2^{(e)}, \dots, \Psi_n^{(e)}$.

$$\{\Psi^{(e)}(M)\}^T = \{P(M)\}^T [T]^{-1} \quad (\text{II.31})$$

f. Calcul des matrices élémentaires

Nous présentons maintenant la démarche générale utilisée pour construire les équations matricielles élémentaires. Pour ce faire, nous utilisons comme point de départ la formulation intégrale de Galarkine:

$$\int_{\Omega} \int \Psi(L\Phi - f) d\Omega = 0 \quad (\text{II.32})$$

Où :

$\Psi = \delta\phi$, avec $\delta\phi$ est une variation de ϕ . Remplaçons l'intégrale dans l'équation (II.32) par une somme d'intégrales sur chaque éléments $\Omega^{(e)}$, nous obtenons [28]:

$$W = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega^{(e)}} \delta\phi^{(e)} (L\phi^{(e)} - f) d\Omega = 0 \quad (\text{II.33})$$

Posons:

$$W^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \delta\phi^{(e)} (L\phi^{(e)} - f) d\Omega \quad (\text{II.34})$$

L'équation (II.34) est appelée forme intégrale élémentaire. Pour calculer les $W^{(e)}$, $e=1,2,\dots,N_e$, nous avons besoin des approximations nodales de $\phi^{(e)}$ et de $\delta\phi^{(e)}$ suivantes:

$$\phi^{(e)} = \{\psi^{(e)}\}^T \{\phi^{(e)}\} \quad (\text{II.35})$$

$$\delta\phi^{(e)} = \{\psi^{(e)}\}^T \{\delta\phi^{(e)}\} \quad (\text{II.36})$$

Dans ce cas, (II.34) devient :

$$W^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \{\psi^{(e)}\}^T \{\delta\phi^{(e)}\} (L(\{\psi^{(e)}\}^T \{\phi^{(e)}\}) - f) d\Omega \quad (\text{II.37})$$

$$W^{(e)} = \{\delta\phi^{(e)}\}^T \left(\left(\int_{\Omega^{(e)}} \{\psi^{(e)}\} L\{\psi^{(e)}\}^T d\Omega \right) \{\phi^{(e)}\} - \int_{\Omega^{(e)}} \{\psi^{(e)}\} f d\Omega \right) \quad (\text{II.38})$$

Sous forme matricielle (II.38) s'écrit:

$$W^{(e)} = \{\delta\phi^{(e)}\}^T ([K^{(e)}] \{\phi^{(e)}\} - \{b^{(e)}\}) \quad (\text{II.39})$$

$[K^{(e)}]$: Matrice élémentaire dont les coefficients sont données par:

$$K_y^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \psi_i^{(e)} L \psi_j^{(e)} d\Omega \quad (\text{II.40})$$

$\{b^{(e)}\}$: Vecteur colonne élémentaire des excitations dans la $i^{\text{ème}}$ composante est donnée par

$$b_y^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \psi_i^{(e)} f d\Omega \quad (\text{II.41})$$

$\{\phi^{(e)}\}$: Vecteur colonne élémentaire des variables nodales.

$\{\delta\phi^{(e)}\}^T$: Le vecteur de ligne élémentaire des variations des variables nodales.

La forme intégrale globale (II.33) s'obtient en additionnant les formes élémentaires (II.39):

$$\sum_{e=1}^{N_e} W^{(e)} = \sum_{e=1}^{N_e} \{\delta\phi^{(e)}\}^T ([K^{(e)}] \{\phi^{(e)}\} - \{b^{(e)}\}) = 0 \quad (\text{II.42})$$

En utilisant la technique d'assemblage nous obtenons la forme matricielle globale:

$[K]$: Matrice globale.

$\{b\}$: Vecteur colonne global des excitations.

$\{\Phi\}$: Vecteur colonne global de toutes les variables nodales.

$\{\delta\Phi\}$: Vecteur colonne des dérivés des variables nodales.

L'équation (II.37) entraine:

$$[K]\{\Phi\} - \{b\} = 0 \quad (\text{II.43})$$

g. Résolution du système d'équations

Comme nous avons vu, la modélisation d'un problème par les méthodes numériques est basée sur la résolution du système matriciel non- linéaire. Pour le résoudre, nous allons lui appliquer une méthode itérative (par exemple la méthode de Newton-Raphson) [16].

La méthode itérative est appliquée jusqu'à ce que la convergence soit atteinte, condition réalisée lorsque la quantité rajoutée au potentiel de l'itération précédente est inférieure à une certaine valeur.

La valeur de cette dernière constitue le critère d'arrêt de la méthode.

IV. Le logiciel Comsol Multiphysics

La procédure d'achat du logiciel Comsol multiphysics au niveau de notre laboratoire est en cours. Cette opération a pris beaucoup de temps, afin de finalisé notre travail de magister, nous avons utilisé la version 3.5.a Démo téléchargé depuis le site de Comsol Multiphysics [32].

IV.1. Introduction

Comsol Multiphysics, anciennement appelé FEMLAB, est avant tout un outil de résolution d'équations aux dérivées partielles par éléments finis. Sa particularité est de disposer d'une base de données d'équations permettant de modéliser différents phénomènes physiques, comme l'électrostatique, ainsi que multiple phénomènes physiques modélisées en PDE. Développé initialement comme une toolbox de MATLAB, il dispose aujourd'hui de son propre environnement graphique permettant à la fois le dessin des géométries et l'affichage de résultats en post-traitement.

Sa spécificité est également de permettre de coupler différentes EDP, de manière à décrire des phénomènes multiphysiques, particulièrement adapté à la micro-électronique. Il est ainsi possible

d'obtenir la déformation d'une membrane due à la pression dans un liquide par exemple. Ou encore l'élévation de température dans un conducteur due au passage d'un courant électrique.

Des fonctions avancées permettent d'entrer manuellement des EDP spécifiques. De plus, les données du logiciel sont accessibles depuis Matlab, ce qui permet la réalisation de scripts.

IV.2. L'interface graphique (le navigateur de modèle)

Au démarrage du logiciel, le navigateur de modèle apparaît. C'est lui qui permettra de spécifier le ou les modèles physiques qui seront utilisés. C'est aussi ici que la dimension de l'espace est choisie. Pour chacun des modèles, il est précisé quelles sont les variables propres à ce modèle.

En effet, il faut créer manuellement des variables pour chaque modèle, toujours dans le navigateur de modèle il est possible de choisir les propriétés du mode d'application et même la forme de l'équation (linéaire, non linéaire ou idéale) toute fois plus de détails sont proposés selon la précision souhaitée.

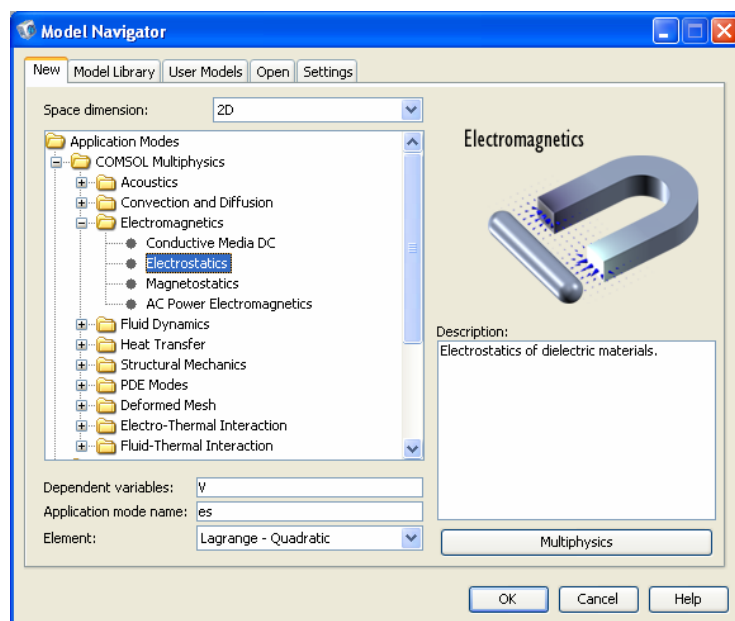


Figure II.7 : Fenêtre principal de Comsol (le navigateur de modèle)

IV.3. Modélisation à l'aide du *Graphical User Interface*

Lorsque le ou les modèles ont été choisis, l'écran général apparaît. Nous allons donc d'abord construire la géométrie du problème. La G.U.I permet de créer le domaine sur lequel

on cherche à résoudre l'E.D.P à l'aide de commandes classiques de logiciels de dessin (rectangles, lignes brisées, ellipses). On peut donc dessiner un large éventail de domaines différents.

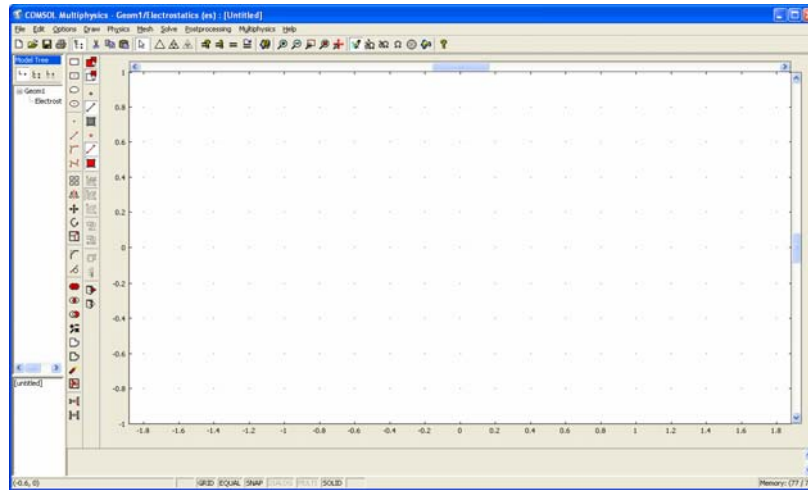


Figure II.8 Graphical User Interface Comsol Multiphysics

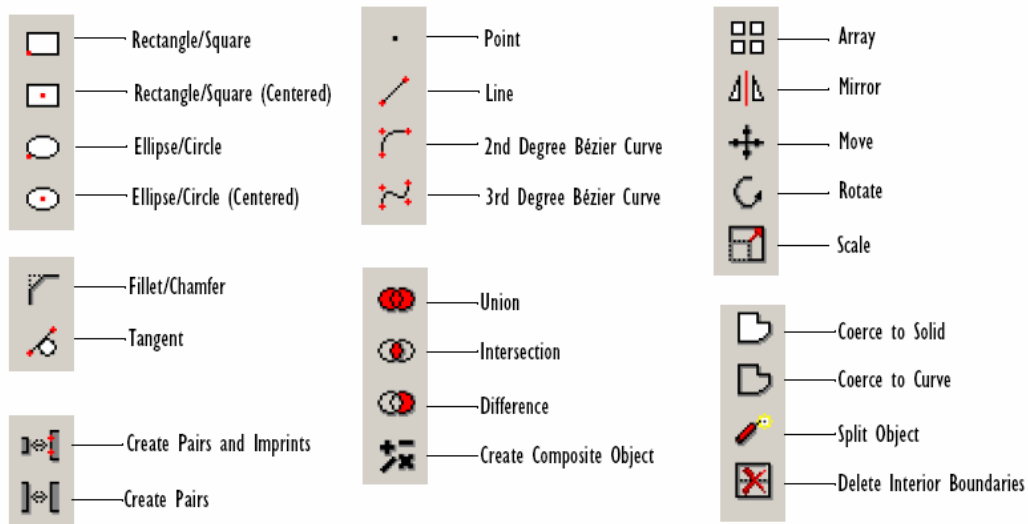
Lorsque le ou les modèles ont été choisis, l'écran général apparaît. Nous allons donc d'abord construire la géométrie du problème. La G.U.I permet de créer le domaine sur lequel on cherche à résoudre l'E.D.P à l'aide de commandes classiques de dessin (rectangles, lignes brisées, ellipses). On peut donc dessiner un large éventail de domaines différents.

On définit ensuite le comportement des domaines en leur associant leurs propriétés. Ensuite, on impose des conditions sur certaines frontières, et éventuellement sur certains points. Cette opération est à refaire pour chaque modèle utilisé. Une fois la physique du problème posée, il faut effectuer le maillage de la géométrie. Il est possible de faire un raffinement local du maillage. Il ne reste ensuite plus qu'à simuler.

Toutes les inconnues sont alors déterminées. Il est possible de les afficher dans la fenêtre de "post-processeur". L'utilisateur peut choisir quelles variables il désire représenter, et sous quelle forme.

IV.3.1 Dessin de la Géométrie

La première chose à faire une fois le programme ouvert est de dessiner la géométrie de notre système. Le mode Dessin 2D par défaut fournit une barre d'outils très variée et complète pour la création de différentes géométries.



IV.4. Modélisation de la physique et des équations

Afin d'établir des modèles dans Comsol Multiphysics nous devons suivre une certaine hiérarchie notamment pour créer un nouveau modèle, spécifier la physique, adapter des équations prédéfinies, écrire nos propre PDEs, modeler la physique sur les géométries multiples, et même d'installer un modèle avec ses :

- Équations
- États de frontière et d'interface
- Propriétés matérielles
- Conditions initiales

IV.4.1. Variable et expression

Pour spécifier un coefficient ou certaine propriété d'un matériau, nous pouvons entrer sa valeur ou une expression directement dans le champ d'édition correspondant. Une telle expression peut contenir:

- Valeurs numériques
- Fonctions mathématiques et logiques
- Coordonnées d'espace, le temps et les variables dépendantes ainsi que leurs dérivés.
- Variables du mode d'application, qui est prédéfinis spécifiquement pour chaque mode d'application

- Opérateurs et des Script et même des fonctions de MATLAB
- Ainsi que d'autres variables prédéfinies, des Constantes, expressions, variables de couplage, fonctions d'interpolation

Nous pouvons définir des constantes et des variables qui simplifie la spécification du modèle. Pour ajouter des constantes et des variables, on utilise les commandes appropriées dans le menu Options :

IV.4.2. Constantes

Les constantes sont globale, c'est à dire qu'ils sont les mêmes pour toutes les géométries et les sous-domaines. Comsol Multiphysics les évalue une fois lorsqu'on clique sur "Appliquer" ou sur "OK" dans la boîte de dialogue constantes. Les constantes peuvent dépendre d'autres constantes et de contenir les fonctions mathématiques des expressions et des variables de couplage.

IV.4.3. Expression des Variables

Ajouter des variables d'expression symbolique ou expressions en utilisant les boîtes de dialogue que vous ouvrez le sous-menu Expressions dans le menu Options. Les expressions sont globales. Avec des expressions aux limites, les expressions de sous-domaine et expressions de point, il est possible également de créer des expressions qui peuvent contenir d'autres variables et expressions.

IV.4.4. Variable de Couplage

Variables de couplage sont de puissantes options qui aide à accomplir un nombre important d'objectifs de modélisation, dont beaucoup sont très inhabituelles dans la nature. Une généralisation des expressions ordinaires, les variables de couplage peuvent définir un accouplement non local y compris les transformations de maille, sur les sous-domaines. Les variables de couplage sont aussi le fondement de l'étendue des capacités multi-physiques dans Comsol Multiphysics.

IV.4.5. Bibliothèque des coefficients/matériaux

La Bibliothèque de Coefficient/Matériaux est une base de données extensible avec des propriétés pour une large collection de coefficient et de propriétés physique, mécanique,

électromagnétique et thermiques regroupées selon le contexte dont le quel ils sont utilisé(physique, élastique, électrique, fluide, piézoélectrique et thermique). Toute fois nous pouvons modifier ou bien ajouter d'autre coefficient. L'accès a cette bibliothèque est facile et nous pouvons transféré directement les propriété a l'application du modèle ouvert.

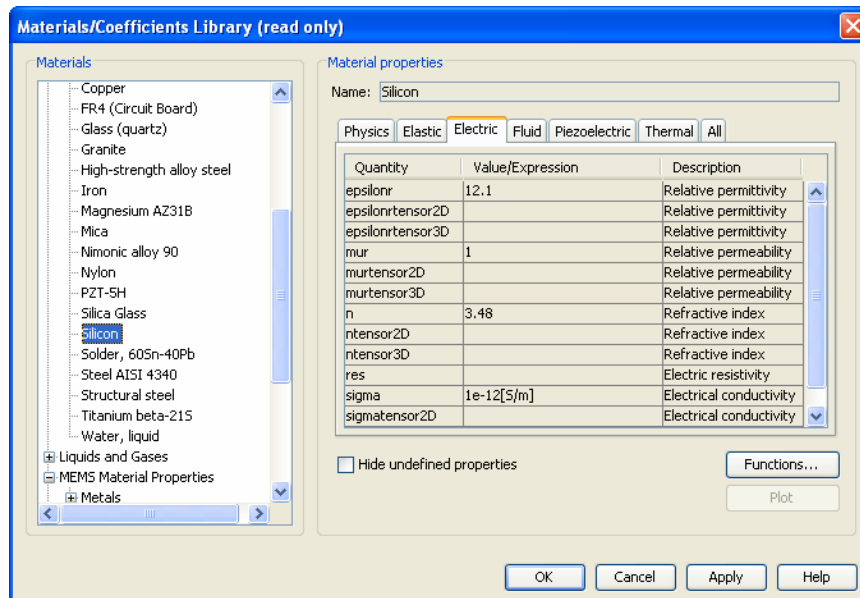


Figure II.9 : fenêtre de la bibliothèque des coefficients /matériaux

IV.5. Introduction des propriétés des domaines et sous-domaine

Le but est ici de définir les paramètres physiques qui définissent le domaine : constante diélectrique, charges volumiques, etc. Les paramètres sont évidemment liés au modèle physique étudié. Il est également possible d'écarter un des domaines du modèle étudié. Nous pouvons toute aussi bien ajouter des expressions au modèle.

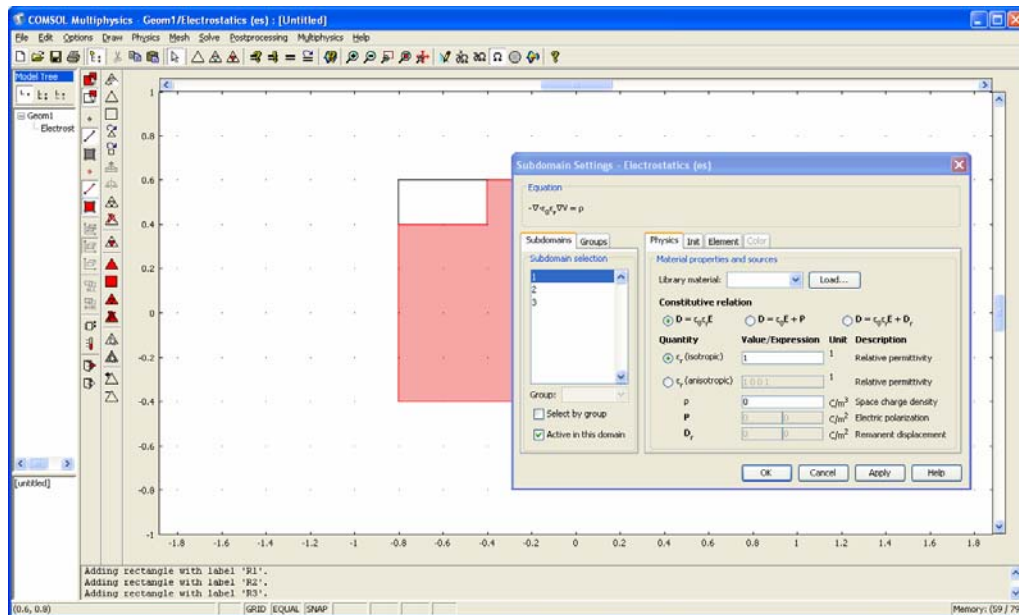


Figure II.10 propriété de sous-domaine Comsol Multiphysics

IV.6. Introduction des conditions aux limites

Pour résoudre les EDP, il est nécessaire de définir un certain nombre de conditions aux limites cohérentes.

A chaque frontière de domaine est associé un segment orienté. Il est possible de donner des valeurs de condition aux limites pour chacun de ces segments. Les options seront différentes suivant qu'il s'agisse ou non d'une frontière intérieure au système.

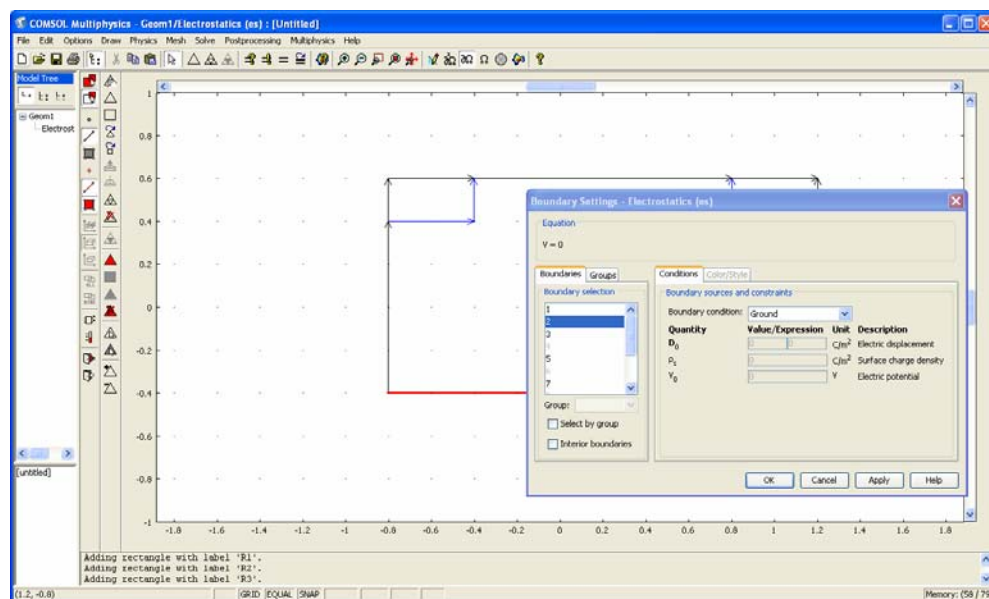


Figure II.11 : Fenêtre des Condition aux limites

IV.7. Création de maille ou maillage

Un maillage est une partition du modèle de la géométrie en petites unités de formes simples. Nous pouvons créer un maillage libre dans Comsol Multiphysics en cliquant sur le bouton Initialiser Mesh sur la barre d'outils principale. Il peut être utilisé sur tous types de géométrie. Il crée des maillages non structurés qui n'ont pas de restrictions en termes de distribution des éléments.

IV.7.1. Eléments de Maille

Pour une géométrie 2D le générateur de maille divise les sous-domaines en éléments triangulaires ou quadrangulaires de maille. Si la frontière est courbée, ces éléments représentent seulement une approximation de la géométrie originale. Les côtés des triangles et des quadrangulaires s'appellent les bords de maille, et leurs coins sont des sommets de maille. Un bord de maille ne doit pas contenir des sommets de maille dans son intérieur. De même, les frontières définies dans la géométrie sont divisées (approximativement) dans des bords de maille.

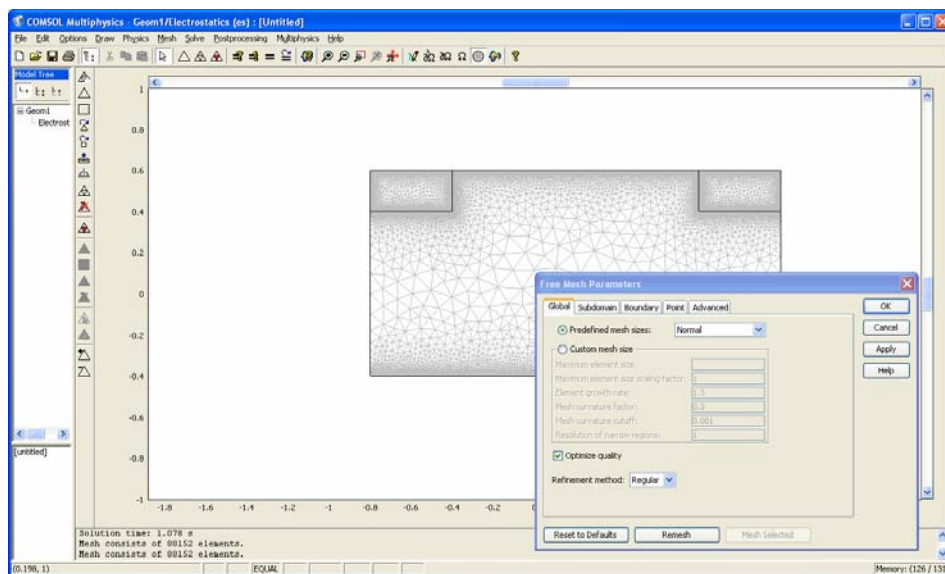


Figure II.12 : Elément du Maillage avec PDE tool

IV.7.2. Création de mailles libres

Lors de la création de mailles libre, le nombre d'éléments du maillage est déterminé par la forme de la géométrie et les paramètres de maille différents. Nous pouvons contrôler les

paramètres de maille en allant dans le menu Mesh et en choisissant *Free Mesh Parameters*, ce qui ouvre la boîte de dialogue Paramètres de maille libre. Avec les paramètres de maille, nous pouvons spécifier un maillage local-élément et le contrôle de la distribution des éléments.

IV.7.3. Les paramètres globaux

La fenêtre apparaissant (figure) nous permet de définir les paramètres de maille qui déterminent la taille des éléments et la distribution des éléments dans la géométrie.

Un maillage prédéfini peut générer une maille extrêmement fines, extra, fine, fine, normal, grossier, grossier, en sus maillage grossier, ou extrêmement grossières. Nous pouvons aussi Personnaliser le maillage si vous souhaitez spécifier manuellement les paramètres de maillage global.

Comsol Multiphysics peut non seulement faire un maillage de Delaunay triangulaire, mais aussi des maillages différents (plus réguliers comme le maillage de Poisson par exemple ou bien d'un maillage quadrangle selon la géométrie du domaine) plus préférable dans certains cas. De plus, on peut aussi obtenir des maillages adaptatifs ou anisotropiques où le nombre d'éléments est bien plus élevés au voisinage de singularités ou bien en des endroits où l'on a besoin de plus de précisions sur la solution, comme par exemple dans le cas du canal dans un transistor MOS, ainsi les endroits où nous n'avons pas besoin d'autant de précision (au niveau du substrat du MOS par exemple) les mailles sont plus grande ce qui nous fait économisé un temps de calcul considérable. Les maillages ressemblent à celui-ci :

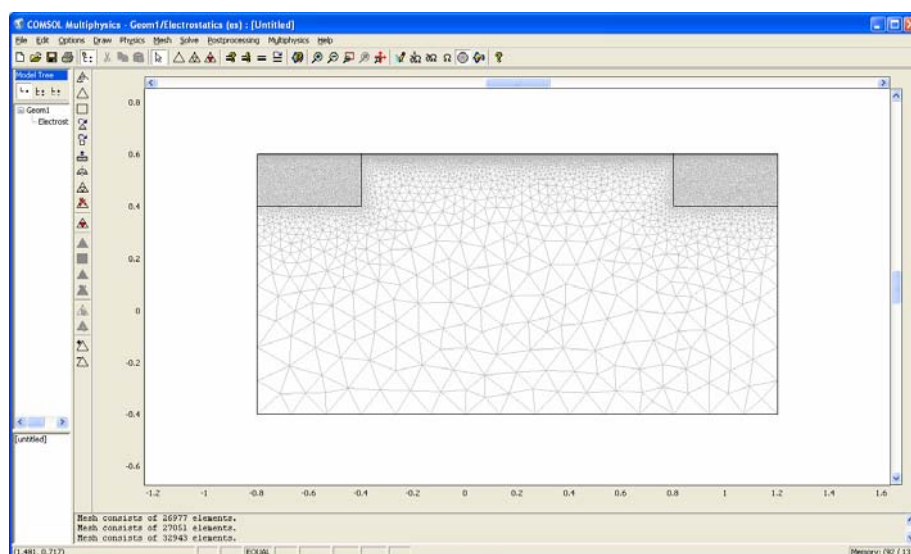


Figure II.13 : Exemple de maillage d'une géométrie d'un MOS avec PDEtool

IV.8. Résolution du problème

Lorsque le problème est complètement défini, il ne reste plus qu'à le résoudre !

Il est recommandé d'examiner les différents solveurs de Comsol Multiphysics ainsi que les paramètres pour choisir le meilleur pour une application donnée. De même, lors de la résolution d'un problème multiphysique, il est possible de ne résoudre que pour une certaine partie des variables.

PDE tool inclut un ensemble de *solver* pour des problèmes à la base de PDE. Les types disponibles sont mentionnés ci-dessous :

- *Stationary solver* (pour la résolution de PDE Stationnaire linéaire ou non linéaire).
- *Time-dependent solver* (pour la résolution de PDE dépendante du Temps linéaire ou non linéaire).
- *Eigenvalue solver* (Pour la résolution de PDE par Valeurs Propres).
- *Parametric solver* (pour la résolution stationnaire de problèmes PDE -linéaire ou non linéaire- dépendant d'un Paramètre).
- *Adaptive solver* (Pour la résolution Stationnaire ou de valeurs propres de problèmes PDE linéaire ou non linéaire avec raffinement adaptatif de maillage).

IV.8.1. Sélection du type d'analyse

Beaucoup de modes d'application suggèrent un ensemble de types d'analyse comme *propriété de mode d'application*. Les types d'analyse possibles varient avec le domaine d'application. Types que vous pouvez compter voir inclure stationnaire, eigenfrequency, coupure, dépendant du temps, et analyses paramétriques.

Nous pouvons choisir le type d'analyse en choisissant la plupart des modes d'application dans le navigateur modèle. Pour changer le type d'analyse on ouvre la zone de dialogue de *propriétés de mode d'application* ou à partir de la liste d'analyse dans la zone de dialogue de paramètres de solutionneur.

Les types d'analyse souvent à installation de diverses équations en mode d'application, et le type suggèrent également un solutionneur de défaut.

Pour dépasser ce défaut, allez à la zone de dialogue de paramètres de solveur. Faire ainsi peut avoir comme conséquence un arrangement d'équation qui est incompatible avec le solveur que vous choisirez. Vous pouvez désactiver le choix automatique de solveur basé sur le type d'analyse en dégageant la boîte de contrôle choisie automatiquement de solveur sous la liste d'analyse dans la zone de dialogue de paramètres de solveur.

IV.8.2. Progression de la résolution

Quand nous résolvons un problème il est utile de savoir ce qui vient après. Dans ce but Comsol Multiphysics fournit une fenêtre de progression. Elle apparaît quand on fait le maillage d'une géométrie, lors de la résolution d'un problème, ou en créant un rapport modèle.

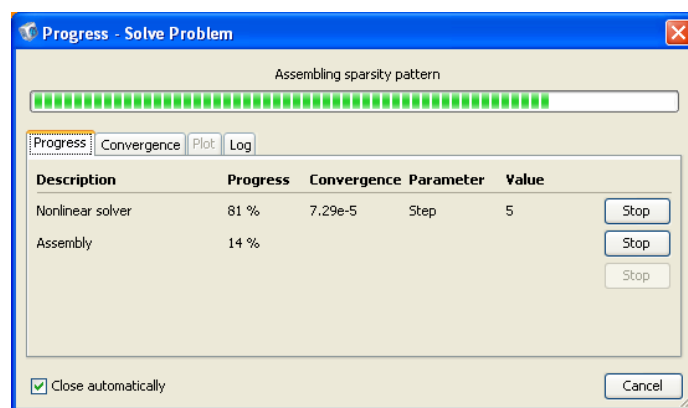


Figure II.14 : fenêtre de progression de la résolution

Au dessus de la fenêtre de progression nous pouvons voir ce qui se produit à l'heure actuelle avec l'évaluation du temps restant.

Le champ de description montre le nom du solveur, le champ de progrès montre une évaluation du progrès du solveur, et le champ de convergence montre une évaluation de la convergence du solveur si disponible. Les champs de paramètre et de valeur contiennent l'information solveur-dépendante : le solveur adaptatif montre le nombre de génération adaptatif ; le solveur dépendant du temps montre le temps ; le solveur paramétrique montre la valeur de paramètre ; le solveur non linéaire et les solveurs de système linéaires itératifs montrent le nombre d'itération.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques méthodes de résolutions telles que la méthode de Green, la méthode de séparation de variables et la méthode de Laplace qui sont des méthodes exactes, la méthode de Ritz qui est une méthode approximative, et la méthode des éléments finis qui est une méthode numérique. Le rappel des méthodes exactes nous permettras de bien apprécier les avantages de la méthode des éléments finis qu'on a choisi d'utilisé pour le développement de notre modèle mathématique au chapitre suivant. Tandis le rappel de la méthode de Ritz nous aidera à bien comprendre le fondement de la méthode des éléments finis.

Pour la résolution numérique du système non linéaire formé par le couplage des équations de Poisson et de Boltzmann un processus itératif a été utilisé. Un potentiel d'essai est choisi (un potentiel initial obtenu par exemple à partir d'un modèle analytique simple). La solution numérique du problème est obtenue quand le potentiel calculé est suffisamment proche du potentiel d'essai, c'est à dire la différence entre le dernier potentiel calculé à l'issue de la $n^{\text{ème}}$ itération devient négligeable.

CHAPITRE III

MODELISATION DU pH-ISFET

I. Introduction

Nous exposons dans ce troisième chapitre notre problème physique à savoir les différents phénomènes électrostatiques que nous pouvons rencontrer dans un capteur ISFET, les états d'interface (l'EDL) ainsi que les phénomènes de diffusion des charges, et leurs modélisations en EDP.

La double couche électrique (EDL) dans un capteur ISFET représente l'interface entre la surface de l'oxyde du MOS et l'électrolyte. La surface chargée attire les cations voisins et repousse les anions dans la solution. L'EDL ou le nuage d'ion est susceptible de réagir aux champs électriques appliqués et peut fortement influencer de divers phénomènes électriques tels que l'électrophorèse, l'électro-osmose, les potentiels d'écoulement et de sédimentation.

Nous étudions en outre quelques modèles numériques d'électrolyte basé sur les théories de site-binding, de Poisson-Boltzmann, de Gouy-Chapman-Stern et les équations de Navier Stocks couplés au modèle connu de la diffusion des charges dans l'électrolyte, nous pouvons ainsi comparer les résultats de plusieurs modèles.

Il était intéressant de représenter les deux parties du capteur ISFET à savoir la partie électronique MOS et la partie électrolyte l'EDL en utilisant l'outil de simulation Comsol Multiphysics du fait qu'il propose une large gamme de PDE pour la modélisation complète de différents phénomènes en plus il offre la possibilité de coupler entre plusieurs phénomènes.

II. Modélisation numérique d'un pH-ISFET :

La figure III.1 représente une coupe transversale d'un pH-ISFET. La source et le drain sont fortement dopées ($\square 10^{20} \text{ cm}^{-3}$), le canal est pratiquement non dopé ($\square 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Tous les calculs ont été effectués à température ambiante. Le modèle numérique de du pH-ISFET est développé en se basant sur l'analyse des potentiels électrostatiques (potentiels de surfaces) couplé au phénomène de diffusion des charges. Ce modèle repose sur la résolution des systèmes d'équations non linéaires bidimensionnelles.

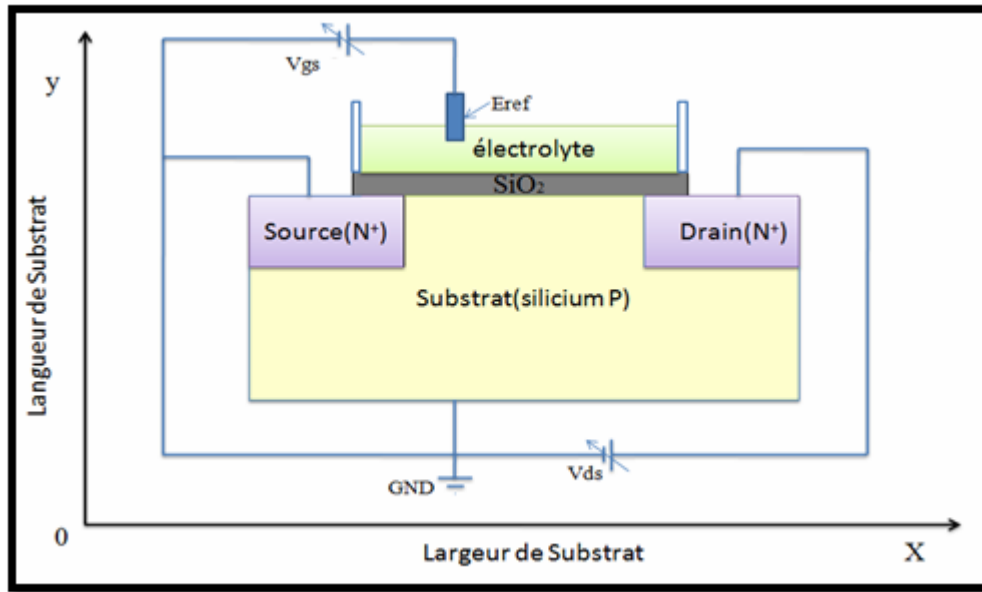


Figure III.1 coupe transversale d'un pH-ISFET

Pour comprendre les phénomènes se produisant dans chaque partie, nous avons choisi de modéliser le capteur en considérant chaque partie du capteur (Partie électrochimique et partie électronique) indépendantes avant de les coupler en un seul dispositif.

III. Modélisation numérique de la partie électronique MOSFET:

Les caractéristiques électriques du transistor MOSFET comme celles de la plupart des dispositifs à semi-conducteurs peuvent être simulées numériquement sur ordinateur et ces simulations sont basées sur la discrétisation du volume du semi-conducteur et des couches avoisinantes en un maillage au nœud duquel sont résolues les équations de transport.

Ici la simulation est de plus en plus précise pour la modélisation des différents phénomènes qui régissent notre dispositif électronique, même en profondeur. Nous présentons un modèle qui décrit la variation du potentiel dans le transistor, en particulier le potentiel de surface dans le canal, ainsi que la distribution des charges.

L'analyse du potentiel électrostatique dans le canal est obtenue par la résolution du système d'équation non linéaire bidimensionnel (2D) et est gouverné par deux lois [34] :

- La loi de la distribution des charges : l'équation de Poisson ;
- La loi de la diffusion du flux des porteurs : première et deuxième loi de Fick.

III.1. Définition du Model

III.1.1. Géométrie du matériau

La structure de la Figure III.2 est une section transversale d'un transistor MOS. Ce modèle utilise les dimensions suivantes: une longueur de grille de 0,2 μm , une épaisseur d'oxyde de grille de 5 nm, et une profondeur de jonction source-drain de 0,1 μm [35].

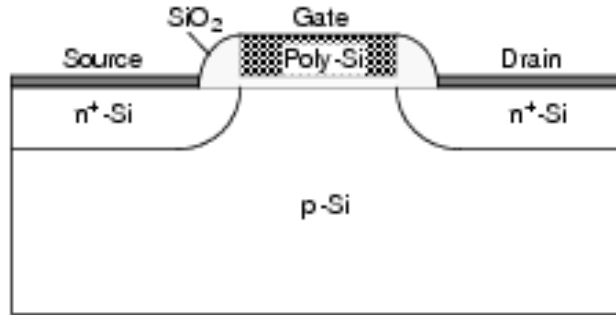


Figure III.2 : La structure du MOS à modéliser [35].

III.1.2. Domain d'équations

Le transistor MOS est modélisé à l'aide de l'approximation standard de la diffusion couplée avec l'équation de Poisson. Avec l'aide de quelques simplifications généralement reconnus, tels que négliger les champs magnétiques, en supposant une densité d'Etats constante à la fois dans les bandes de valence et de conduction, et en supposant une distribution de Boltzmann des porteurs, il est possible de dériver ces équations à partir des équations de Maxwell et de la théorie de transport de Boltzmann.

Le modèle formule le problème en utilisant trois variables dépendantes: ψ (le potentiel électrostatique), n et p . Les trois équations de base des semi-conducteurs sont :

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = q(p - n + N) \quad (\text{III.1})$$

$$-\nabla \cdot J_n = -qR_{SRH} \quad \text{et} \quad -\nabla \cdot J_p = qR_{SRH} \quad (\text{III.2})$$

Où p et n sont les concentrations de trous et d'électrons, respectivement, et N représente les charges fixes associés aux donneurs ionisés. Les densités de courant d'électrons et de trous, J_n et J_p , sont exprimés avec un terme de diffusion :

$$I_n = -qn\mu_n \nabla \psi + qD_n \nabla n \quad (\text{III.3})$$

$$I_p = -qp\mu_p \nabla \psi - qD_p \nabla p \quad (\text{III.4})$$

Où μ_n et μ_p sont les mobilités des porteurs, et D_n et D_p sont les diffusivités des porteurs.

Un autre terme, R_{SRH} , représente la *recombinaison de Shockley-Read-Hall* [36], qui est un processus de recombinaison générale. Dans l'équation de la recombinaison :

$$R_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (\text{III.5})$$

n_i est la concentration de porteurs intrinsèques, τ_n et τ_p sont les durées de vie des porteurs, et n_1 et p_1 sont des paramètres liés au niveau d'énergie. Si ce niveau est situé au milieu de E_g (supposé dans ce modèle), n_1 et p_1 seront égales à la concentration des porteurs intrinsèques, n_i .

III.1.3. Conditions aux limites

Pour les limites en contact avec un isolant ou loin de la zone périphérique active, on utilise la condition aux limites « symétrie ou de charge nulle » soit en mode d'application « électrostatique » et/ou de « diffusion ». Aux frontières en contact avec un métal ou un électrolyte, le potentiel électrostatique est fixe. Pour la diffusion en supposant que la vitesse de recombinaison est infinie au contact, la loi d'action de masse est valide.

$$np = n_i^2 \quad (\text{III.6})$$

Il est alors possible de calculer les concentrations des porteurs. La tension appliquée est égal au niveau de Fermi dans les semi-conducteurs au niveau du contact, de sorte que le potentiel électrostatique au niveau du contact est la tension appliquée, plus la différence de potentiel entre le niveau de Fermi et le niveau de référence électrostatiques:

$$\psi = V_a - \chi_{Si} - \frac{E_g}{2} + \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{\frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + n_i^2}}{n_i} \right) \quad (\text{III.7})$$

$$n = \frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (\text{III.8})$$

$$p = -\frac{N}{2} + \sqrt{\left(\frac{N}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (\text{III.9})$$

Les paramètres de la matière dans le transistor MOS sont les suivants:

NOTATION	VARIABLE	VALEURES
$n_i(\text{Si})$	ni_Si	$1.46 \cdot 10^{16} \text{ m}^{-3} (T = 300\text{K})$
$\epsilon_r(\text{Si})$	epsilon_r_Si	11.8
$\epsilon_r(\text{SiO}_2)$	epsilon_r_SiO2	4.2
$\mu_n(\text{Si})$	mun	$0.10 \text{ m}^2/\text{Vs}$ (low concentration)
$\mu_p(\text{Si})$	mup	$0.05 \text{ m}^2/\text{Vs}$ (low concentration)
$D_n = \mu_n(\text{Si}) kT/q$	Dn	$20.7 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
$D_p = \mu_p(\text{Si}) kT/q$	Dp	$5.17 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
τ_n	taun	$\sim 0.1 \mu\text{s}$
τ_p	taup	$\sim 0.1 \mu\text{s}$
$E_G(\text{Si})$	Eg_Si	1.08 eV
χ_{Si}	X_Si	4.0 eV
χ_{SiO_2}	X_SiO2	0.3 eV
χ_{Poly}	X_poly	4.2 eV

Tableau III.1 : Paramètres de la matière dans le transistor MOS

III.2. Le mode d'application Diffusion

Le mode d'application “Diffusion” traite d'un mécanisme spécifique de transport de masse

III.2.1. Formulation en EDP : La diffusion est régie par l'équation suivante :

$$\delta_{ts} \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c) = R \quad (\text{III.10})$$

Où : c est la concentration, D est le coefficient de diffusion, et R est la vitesse de réaction.

III.2.2. Condition aux limites :

➤ **Concentration :** $c = c_0$

Dans l'équation de la condition aux limites de concentration c_0 est une opération où la concentration est spécifiée par l'utilisateur.

➤ **Flux diffusif :** $-\mathbf{n} \cdot (-D\nabla c) = N_0 + k_c(c_b - c)$

Dans l'équation de la condition de flux, k_c représente le coefficient de transfert de masse, c_b est la concentration en vrac, et N_0 est une expression du flux spécifié arbitrairement par l'utilisateur.

➤ **Limite Couche Mince :** $\mathbf{n} \cdot (\mathbf{N}_1 - \mathbf{D}_2) = \frac{D}{d}(c_1 - c_2)$

Le modèle de condition aux limites en couche mince d'un matériau est un coefficient de diffusion plus petit par rapport aux domaines adjacents. La couche a une épaisseur 'd' et D est le coefficient de diffusion.

➤ **Symétrie Axiale :** $\mathbf{n} \cdot (-D\nabla c) = 0$

La condition de symétrie axiale est identique à celle **isolation / condition de symétrie**. Il est disponible uniquement pour les modèles axisymétriques. C'est-à-dire une condition aux limites sur l'axe de symétrie.

III.3. Le mode Application Electrostatique

Les applications portant sur l'électrostatique comprennent les appareils à haute tension, les dispositifs électroniques, et les condensateurs. Le terme «statique» signifie que le taux de variation du champ électrique est lent, et que les longueurs d'onde sont très grandes par rapport à la taille du domaine étudié.

III.3.1. Formulation en EDP :

COMSOL Multiphysics effectue la modélisation des champs électriques statiques en utilisant le potentiel électrique V. En combinant la définition du potentiel avec la loi de Gauss et l'équation de continuité, il est possible de dériver l'équation classique de Poisson. Plus précisément, dans des conditions statiques du potentiel électrique, V, est défini par la relation :

$$\mathbf{E} = -\nabla V \quad (\text{III.11})$$

Et la relation :

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (\text{III.12})$$

Il est possible de représenter la loi de Gauss qui devient l'équation de Poisson

$$-\nabla \cdot (\epsilon_0 \nabla V - \mathbf{P}) = \rho \quad (\text{III.13})$$

III.3.2. Condition aux limites :

La condition d'interface appropriée au niveau des interfaces entre les différents médias pour ce mode est :

$$\mathbf{n}_2 \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) = \rho_s$$

En l'absence de charges extérieures, cette condition est remplie par l'état de frontière normale

$$\mathbf{n} \cdot [(\epsilon_0 \nabla V - \mathbf{P})_1 - (\epsilon_0 \nabla V - \mathbf{P})_2] = -\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) = 0$$

➤ **Déplacement Electrique** : L'état de frontière d'un déplacement électrique est :

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}_0$$

Spécifie le composant normal du déplacement électrique à une frontière.

➤ **Charge de Surface** : La condition aux limites dans le cas d'une charge de surface est :

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = \rho_s, \quad \mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) = \rho_s$$

Spécifie la densité de charge à une frontière externe ou à une frontière intérieure entre deux médias non conducteurs.

➤ **Zero charge /Symmetry** : La condition aux limites zéro de charge/symétrie :

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = 0$$

Spécifie que le déplacement électrique est égal à zéro. Cet état de frontière s'applique également aux frontières où le potentiel est connu être symétrique.

➤ **Potentiel Electrique** : La condition aux limites dans le cas d'un potentiel électrique

$$V = V_0$$

Spécifie la tension à une certaine limite. Ici nous devons définir la valeur du potentiel à une frontière de la géométrie.

➤ **Ground** : La condition à la limite de la masse

$$V = 0$$

C'est un cas particulier de la précédente, mais en précisant que le potentiel est égal à zéro.

- **Continuité** : La condition limite la continuité

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) = 0$$

Précise que la composante normale du déplacement électrique est continue à travers la frontière.

- **Limite Couche Mince** : La condition limite en couche mince :

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_2) = \frac{\varepsilon}{d}(V_1 - V_2)$$

Cette condition est utilisée pour modéliser une couche mince d'un matériau à faible permittivité par rapport aux domaines adjacents. La couche a une épaisseur 'd' et le Coefficient diélectrique ε_r . Cette condition limite est uniquement disponible à la frontière entre les différentes couches.

- **Symétrie Axial** : Dans ce genre de modèles, l'utilisation de la condition limite pour la symétrie axiale sur l'axe de symétrie $r = 0$.

Nous pouvons appliquer une charge Q_L le long d'une ligne des bords ou même appliquer une charge ponctuelle Q_0 sur un point dans la géométrie.

Ici nous imposant des potentiel linéique le long des bords en contact avec les contacte ohmique de source, de drain et de grille fournis comme des charges électriques par unité de longueur.

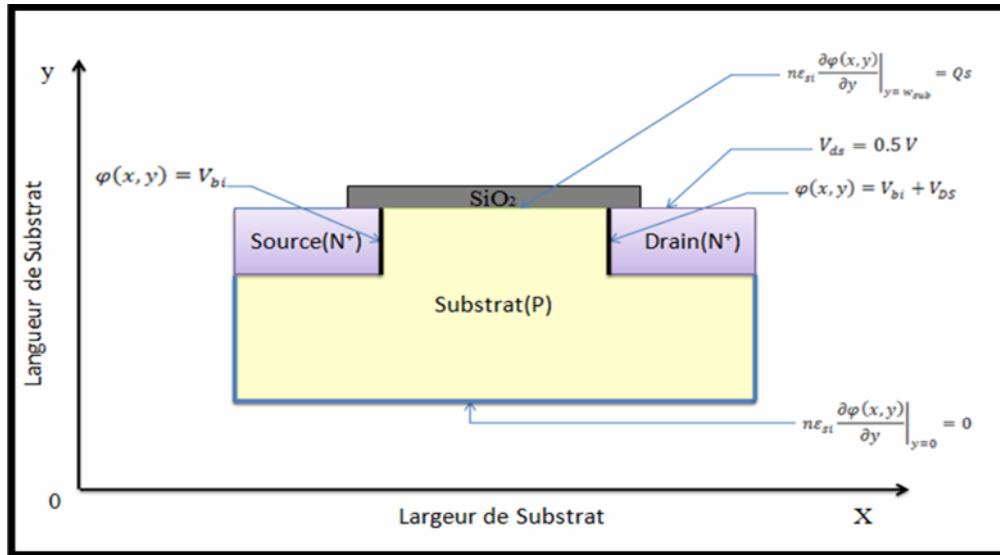


Figure III.3 : structure à modéliser du capteur pH-ISFET [37]

IV. Résultat de la modélisation de la partie électronique de capteur :

IV.1. Maillage :

Le maillage des domaines est automatique. Il est possible de le raffiner globalement ou de manière localisée.

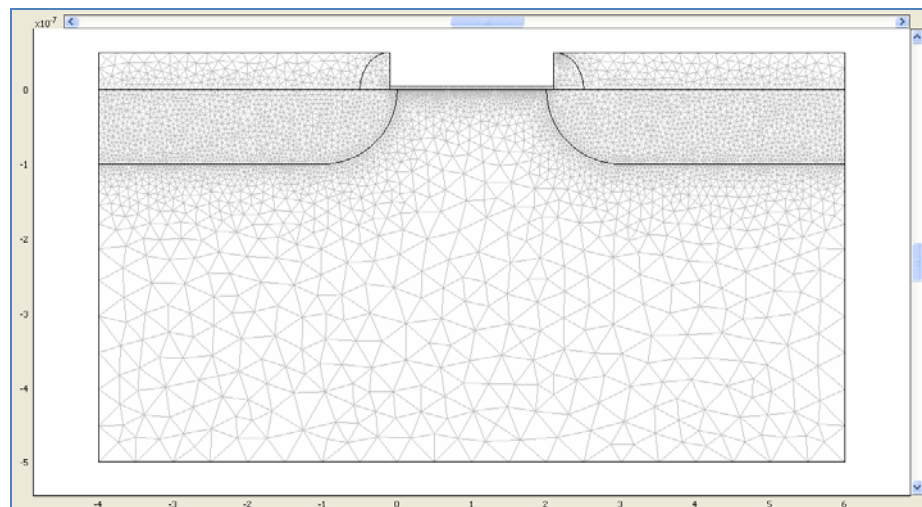


Figure III.4 : maillage de la structure du capteur pH-ISFET

IV.2. Résolution du problème :

Lorsque le problème est complètement défini, il ne reste plus qu'à le résoudre. Nous pouvons accéder aux menus pour paramétrer la résolution. De même, lors de la résolution d'un problème multiphysique, il est possible de ne le résoudre que pour une certaine partie des variables.

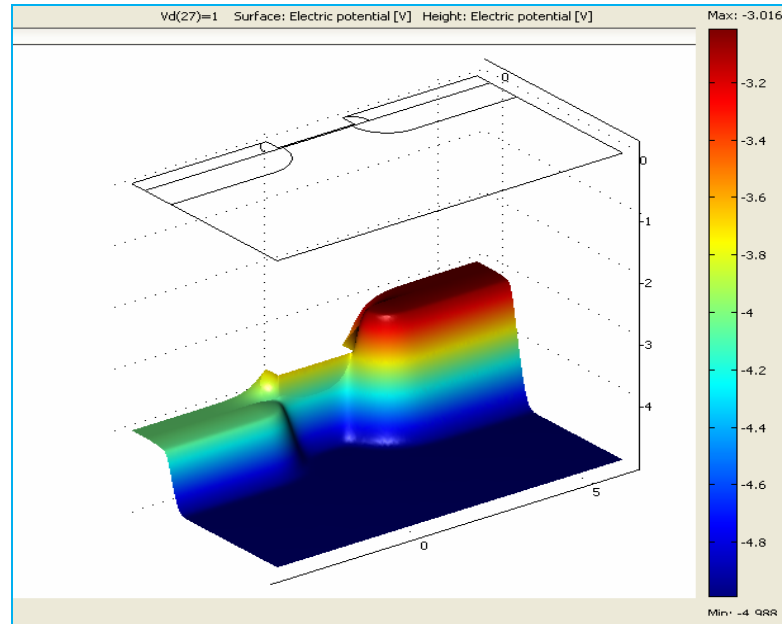


Figure III.5: variation de potentiel dans le pH-ISFET en 3 dimensions

Nous observons sur la figure(III.5), que le potentiel est maximal à la surface du canal et diminue en s'éloignant de celle-ci vers le substrat. Le potentiel augmente de la source vers le drain et atteint sa valeur maximale de côté drain où le potentiel de surface prend la valeur $\varphi_s = 0,39 \text{ V}$ indiquant l'établissement du régime de forte inversion. Cette valeur de φ_s obtenue sera utilisée par la suite afin de définir la tension de seuil de l'ISFET.

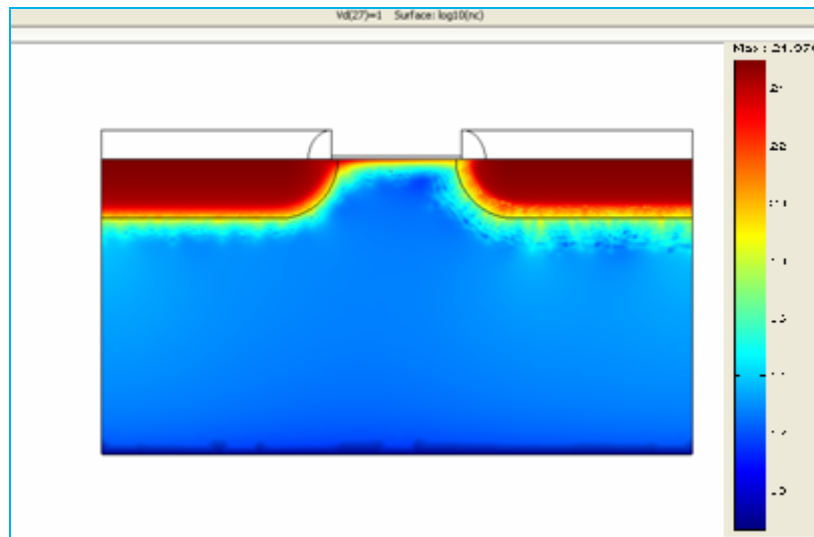


Figure III.6 : distribution des porteurs dans la partie MOS de l'ISFET en 2 dimensions

Nous observons sur la figure (III.6), la répartition des porteurs de charges ainsi que la concentration des électrons au niveau de la source et du drain et bien entendu au niveau du canal dont on aperçoit le pincement près du drain.

V. Modélisation numérique de la partie électrochimique (l'électrolyte) :

La double couche électrique (EDL) représente l'interface entre une surface solide (électrode polarisée) et un électrolyte. La surface de charge attire des ions à proximité et repousse les co-ions présents dans la solution. Ce phénomène crée des interactions électrostatiques qui donnent naissance à un nuage d'ions. L'EDL ou le nuage d'ion est susceptible de réagir au champ électrique appliqué et peut fortement influencer divers phénomènes électriques tels que le diélectrophorèse, l'électrophoresis de polyélectrolytes ou flux électrocinétique.

Dans cette partie, nous considérons que les électrodes sont idéalement polarisables c'est-à-dire aucun transfert d'électrons (électrochimiques) et les réactions se produisent à l'électrode. Le modèle qui a donné naissance à la notion de «double couche électrique» a été mis en avant dans les années 1850 par Helmholtz. L'interface reste neutre, la charge de surface sur une électrode polarisée est équilibrée par la redistribution des ions à proximité de la surface de l'électrode.

Du point de vue d'Helmholtz, dans cette région, les ions attirés sont supposés près de la surface de l'électrode et avec une distance supposée être limitée à la taille de l'ion : le résultat global est deux couches de charge (la double couche) et une chute de tension linéaire qui est confinée à cette région seulement.

Un modèle plus tard avancé par Gouy et Chapman suppose que les ions sont en mesure de se déplacer en solution et ainsi les interactions électrostatiques sont en concurrence avec le mouvement brownien. Le résultat est encore une région proche de la surface de l'électrode contenant un excès d'un type d'ion, mais maintenant la chute de potentiel est exponentielle et se produit sur la région appelée la couche diffuse:

La couche diffuse est considérée comme étant directement en contact avec la surface chargée. Au niveau de cette surface, nous pouvons considérer comme connue, soit le potentiel, soit la charge (Figure III.7).

La représentation la plus commune de la double couche électrique (EDL) est celle de Stern (1924) : l'EDL se compose de deux couches (voir la Figure III.7.b). La couche intérieure (appelée la couche compacte) qui est en contact avec l'électrode et où des ions sont absorbés dessus sur la surface due aux interactions électrostatiques élevées. En dehors de la couche compacte, il y a la double couche diffuse :

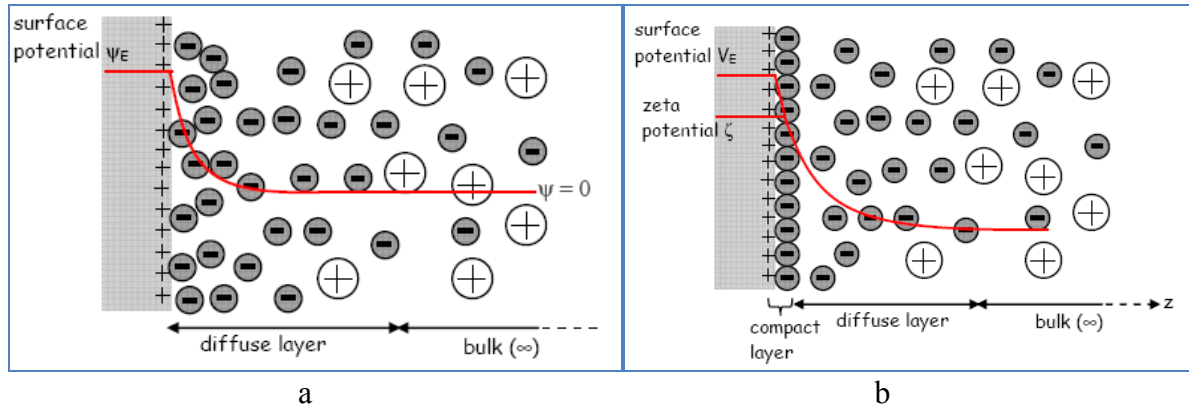


Figure III.7: La représentation de la double couche électrique [37].

a) modèle de Gouy-Chapman. b) modèle de Stern.

Dans l'équation de Poisson-Boltzmann, Les ions sont considérés comme des charges ponctuelles. La solution ionique est supposé être une solution diluée (donc les ions n'interagissent pas les uns avec les autres) et le solvant (eau) est considéré comme un continuum diélectrique de permittivité $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$. Les charges de surface y provoquent un potentiel électrique $\varphi(V)$ dans l'électrolyte qui agit sur chaque espèce d'ions.

A l'équilibre thermique, la concentration c_i (ions/m³) en ions de charge q_i suit une statistique de Boltzmann :

$$c_i = c_i^0 \exp\left(-\frac{q_i \varphi}{k_B T}\right) \quad (\text{III.14})$$

Ou c_i^0 est la concentration en ions de charge q_i loin de la surface chargée, là où le champ électrique est nul ; T est la température exprimée en Kelvin ; k_B est la constante de Boltzmann qui relie température et énergie thermique ($k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J / K).

En présence de n types d'ions de charge q_i ($i=1, \dots, n$), la densité de charge est donnée par :

$$\rho_e(x, y) = \sum_i c_i q_i = \sum_i q_i c_i^0 \exp\left(\frac{q_i \varphi(x, y)}{k_B T}\right) \quad (\text{III.15})$$

En insérant l'expression de la densité de charge dans l'équation de Poisson, on obtient l'équation de Poisson-Boltzmann qui ne porte plus que sur le potentiel électrique :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \sum_i q_i c_i^0 \exp\left(\frac{q_i \varphi(x, y)}{k_B T}\right) \quad (\text{III.16})$$

Cette équation prend une forme plus simple dans le cas d'une solution d'électrolyte, c'est-à-dire que les ions positifs et négatifs en présence sont monovalents (par exemple : chlorure de sodium NaCl, chlorure de potassium KCl). En effet seuls deux types d'ions sont présents : des ions positifs de charge '+e' et de concentration c^+ , ainsi que des ions négatifs de charge '-e' et de concentration c^- .

Les ions positifs c_+^0 et négatifs c_-^0 sont toutes deux égales à la concentration en électrolyte de la solution c_s^0 , l'expression de la densité de charge se simplifie alors :

$$\rho_s(x, y) = e c_+^0 - e c_-^0 = e c_s^0 \left[\exp\left(\frac{-e\varphi(x, y)}{kT}\right) - \exp\left(\frac{+e\varphi(x, y)}{kT}\right) \right] \quad (\text{III.17})$$

$$\rho_s(x, y) = -2e c_s^0 \sinh\left(\frac{e\varphi(x, y)}{kT}\right) \quad (\text{III.18})$$

Les conditions aux limites associées à l'équation de Poisson-Boltzmann sont les plus classiques utilisées en électrostatique.

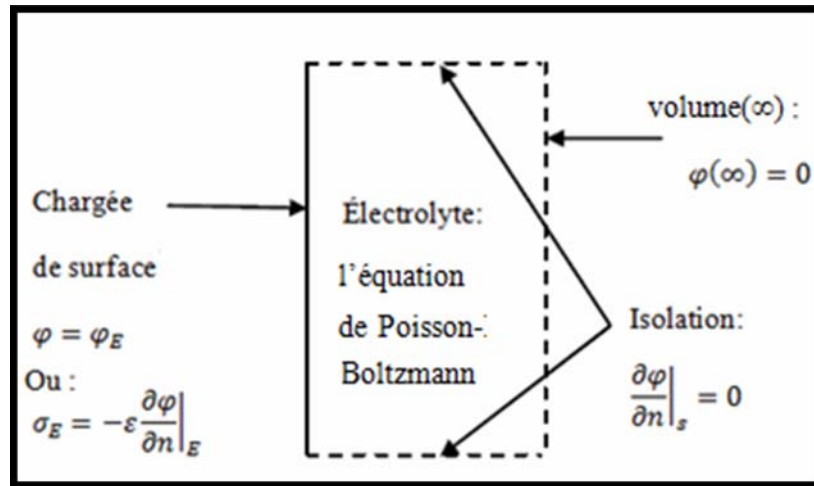


Figure III.8 : Conditions aux limites associées à l'équation de Poisson-Boltzmann en 2 dimensions [38].

V.1. La théorie de Debye-Huckel : l'équation de PB linéarisé :

La linéarisation de l'équation de GC est obtenue avec la supposition que l'énergie électrostatique est plus petite que l'énergie thermique

$$|\psi| \ll \psi_T = \frac{kT}{ze} \quad (\text{III.19})$$

Etude et sur $\vec{\nabla} \cdot (-\epsilon \vec{\nabla} \psi) = -\frac{2Z^2 e^2 c^\infty}{kT}$

ase de FET

$$\vec{\nabla} \cdot (-\epsilon \vec{\nabla} \psi) = -\frac{2z^2 e^2 c^\infty}{kT} \quad (\text{III.20})$$

Cette équation admet la solution suivante :

$$\psi(z) = \zeta e^{-\frac{z}{K^{-1}}} \quad (\text{III.21})$$

En s'éloignant de l'électrode polarisée, le potentiel diminue exponentiellement avec une longueur caractéristique k^{-1} appelée la longueur de Debye :

$$K^{-1} = \sqrt{\frac{\epsilon kT}{2z^2 e^2 c^\infty}} \quad (\text{III.22})$$

La longueur de Debye (λ_D) est employée couramment pour estimer l'épaisseur d'EDL parce que sa formule simple dépend seulement des caractéristiques d'électrolyte. En ce document, nous considérons toujours le cas d'un électrolyte aqueux ($\epsilon_r = 78.5$) à la température ambiante (298 K).

La théorie de Debye-Hückel [39] est très restreinte pour les microsystèmes parce que les tensions de l'électrode appliquées sont souvent beaucoup plus grandes que le Ψ_T . L'équation de PB est fortement non linéaire et notre premier souci est d'évaluer comment notre simulateur et la méthode des éléments finis peuvent remédier à cette difficulté.

V.2. La validation analytique de l'équation de PB

L'équation de PB est mise en application dans notre simulateur comme équation aux dérivées partielles. La validation du modèle numérique de PB est faite par la comparaison des solutions numériques à partir des équations de PB (5) et de GC (7) avec les solutions analytiques dans le cas des électrolytes semi-infinis symétriques binaires en contact avec une surface polarisée [40] :

$$\psi(z) = \frac{4kT}{ze} \operatorname{arctanh} \left[\tanh \left(\frac{ze\psi_g}{4kT} \right) e^{-\kappa z} \right] \quad (\text{III.23})$$

V.3. Présentation du modèle et aspects numériques :

La première étape sera donc de dessiner la géométrie en respectant les dimensions du micro-capteur que l'on veut modéliser. Sachant qu'ici nous allons prendre en considération que la partie chimique à savoir l'électrolyte, nous allons simuler différentes approches pour la

modélisation des solvants à l'interface d'un solide tel que ; le modèle de Poisson Boltzmann, le modèle de Gouy Chapman [41] et un modèle analytique proposé par Pham et al[39].

Après avoir spécifié la physique ainsi que le modèle on introduit les constantes et les conditions aux limites (l'interface avec les parois, l'oxyde et l'électrode de référence). L'étape suivante sera la génération du maillage qui est assuré par l'outil de simulation, ici nous pouvons spécifier la géométrie des maille ainsi que leur nombre et leur tailles, ceci nous permet de faire un maillage adaptatif plus raffiné au bord des surfaces chargées et moins raffiné à l'intérieur ou on n'a pas besoins de beaucoup de précision. La résolution du système d'équations se fait par la méthode des éléments finis. Lorsque le programme converge vers une solution, il bascule automatiquement vers la fenêtre ('postprocessing'), qui permet d'analyser les résultats du potentiel. Il est toute fois possible de visualiser la progression de la résolution ainsi que sa convergence et le nombre d'itérations.

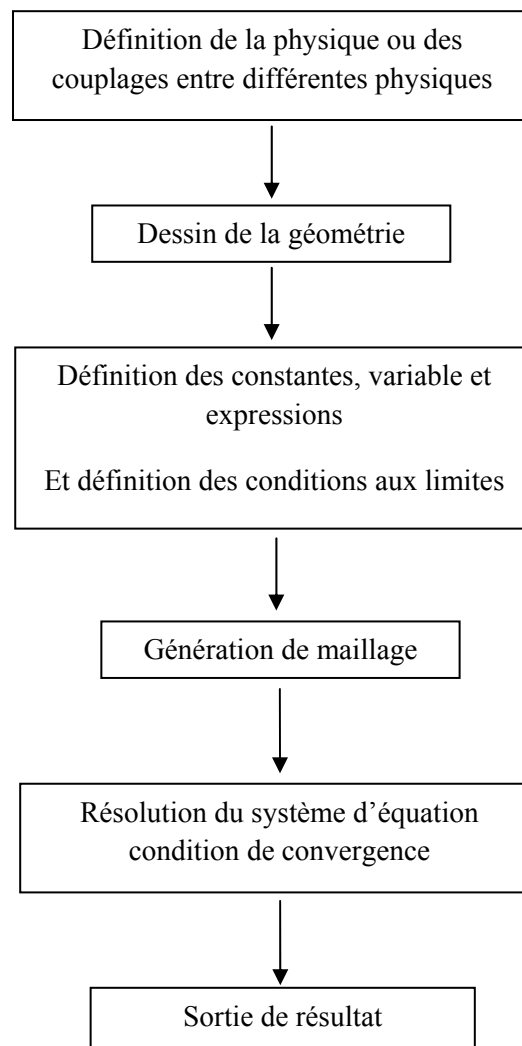


Figure III.9 Organigramme général de la procédure numérique de la résolution d'un système d'équations au dérivé partiel (dans notre cas eq de PB pour l'application électrochimique)

Nous avons réalisé l'opération sur la géométrie de la figure (III.7) pour différents types de concentrations en volume de l'électrolyte, à pH variables et potentiels de surface Ψ_E variables.

Dans les deux figures (III.10) et (III.11), les courbes ont été dessinées pour les potentiels de surface Ψ_E de +50 mV et +1V et c concentrations en volume de 0.01M et de 0.1M.

La solution numérique de l'équation de PB (III.16) et de l'équation de CG (III.20) est dans une bonne concordance avec la solution analytique (III.23).

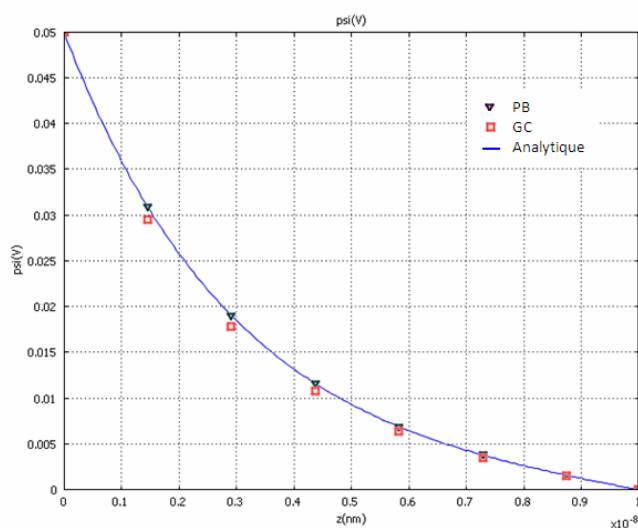


Figure III.10 : Comparaison des potentiels électriques numériques (PB, CG) et analytiques pour une concentration en volume de 0.01M et un potentiel de 50mV

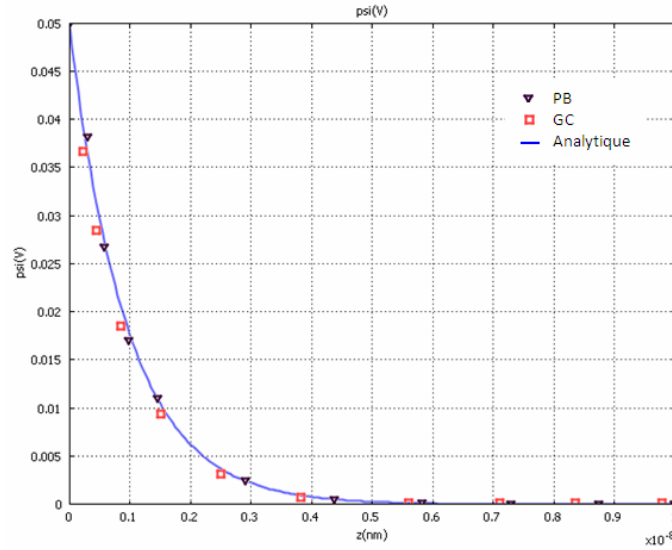


Figure III.11 : Comparaison des potentiels électriques numériques (PB, CG) et analytiques pour une concentration en volume de 0.1M et un potentiel de 50mV

Nous remarquons une très bonne concordance entre le modèle de PB et le modèle de GC, la résolution analytique de ces équations nous a permis de valider notre modèle pour plusieurs concentrations en volume mais pour des faibles potentiels.

La figure (III.12) compare la longueur de Debye à la largeur d'EDL calculée par l'équation de PB et l'équation de GC selon la concentration en volume d'un électrolyte, pour la tension appliquée +0.1V. Comme prévu, la longueur de Debye sous-estime la largeur d'EDL et l'erreur commise est tout à fait importante et elle augmente quand la concentration en volume diminue.

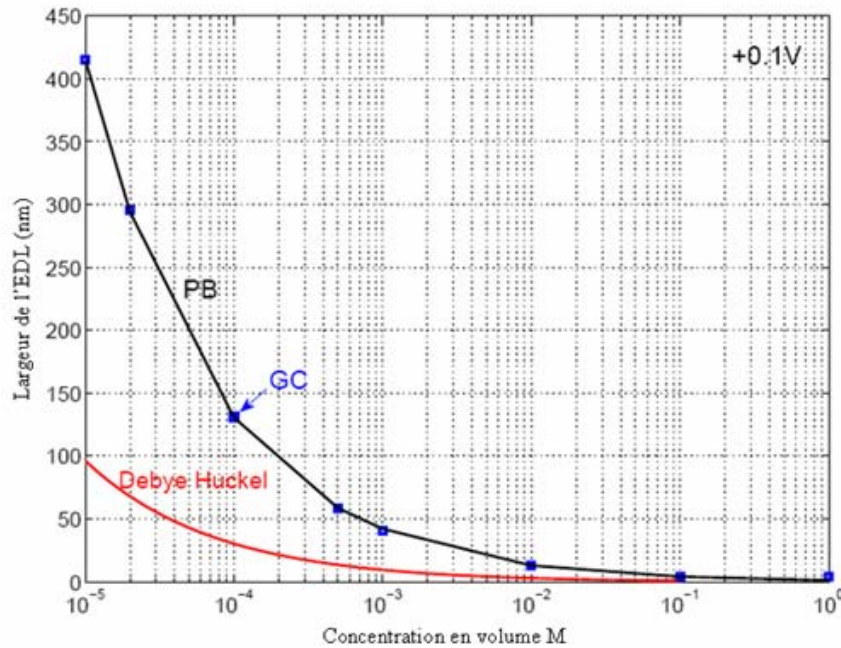


Figure III.12 : La largeur d'EDL selon la concentration, à +0.1V :
l'équation de GC de PB et la formule analytique de la longueur de Debye

V.4. Limitation de la validité de l'équation de Poisson Boltzmann :

On pourrait s'attendre à ce que l'équation de PB (et l'équation de GC pour les électrolytes binaires symétriques), lorsqu'elle sera entièrement résolue dans le régime non linéaire ($\Psi > \Psi_T$), donnerait une bonne estimation de l'EDL. Cependant, même à des grandes valeurs des potentiels appliqués, les équations de GC et de PB ont une applicabilité limitée. Une des hypothèses formulées dans l'équation de PB est que les ions sont des charges ponctuelles. Cela signifie que les ions sont considérés comme n'ayant pas de taille. La conséquence est que l'équation PB peut prédire une concentration infinie de contre-ions près de la surface chargée, ce qui n'est pas réaliste. Ici, nous utilisons le modèle numérique PB pour déterminer la zone dans laquelle l'équation PB est valide, la limite étant donnée par l'effet stérique qui correspond à une concentration maximale atteinte à la surface de charge due aux ions hydratés.

V.5. L'équation Modifiée de Poisson Boltzmann (MPB)

Récemment, une équation tenant compte des effets stériques des ions a été proposée par Kilic et al [41]. Elle est appelée l'équation Modifiée de Poisson-Boltzmann (MPB). Dans l'équation de MPB, la partie distribution de Boltzmann de l'équation PB est modifiée.

La modification de la distribution de Boltzmann est donnée par l'expression suivante:

$$C_i = \frac{c_i^\infty e^{-\frac{z_i e \psi}{kT}}}{1 + 2v \sinh^2 \left[\frac{z_i e \psi}{2kT} \right]} \quad (\text{III.24})$$

où v est le paramètre de conditionnement tels que

$$v = 2 a^3 c^\infty \quad (\text{III.25})$$

et a est la taille effective de l'ion. Nous considérons ici a tel que le diamètre de l'ion hydraté. Pour un binaire symétrique $z : z$ électrolyte, l'équation MPB peut être écrite comme suit [3]:

$$\bar{\nabla} \cdot (-\epsilon \bar{\nabla} \psi) = -z e c^\infty \frac{2 \sinh \left[\frac{z_i e \psi}{2kT} \right]}{1 + 2v \sinh^2 \left[\frac{z_i e \psi}{2kT} \right]} \quad (\text{III.26})$$

L'équation de MPB (III.26) peut être généralisée à électrolyte non symétrique en combinant (III.25) avec (III.1).

Dans la figure (III.13) : la formule (III.25) est portée en fonction de la tension appliquée et Ψ_E par rapport à la distribution PB (III.14). La distribution PB prévoit une augmentation continue de la concentration des ions à la surface avec le potentiel de surface. Avec la distribution MPB, la concentration de chaque ion sature et ne peut excéder la limite stérique donnée par a^{-3} .

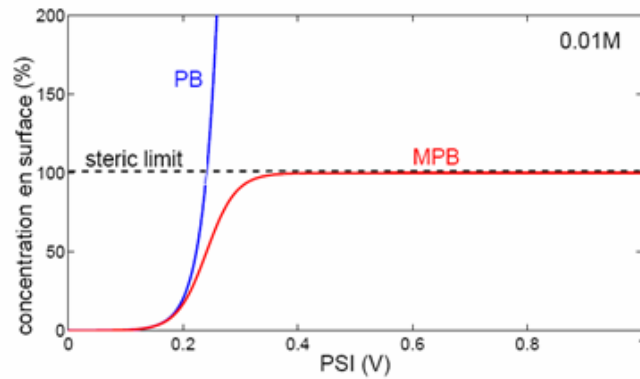


Figure III.13 : Comparaison de la concentration de surface (% de la concentration maximale proposée par la limite stérique) pour la distribution PB (bleu) et la distribution de MPB (rouge) en fonction de la tension positive appliquée. Avec une concentration en volume de 0,01 M.

Sur la figure (III.14), l'équation MPB a été retrouvée dans des conditions quasi-linéaires ($+0.1V$, $0.01M$): comme prévu, la solution du MPB et de la solution PB ne sont plus identiques et présentent un léger décalage.

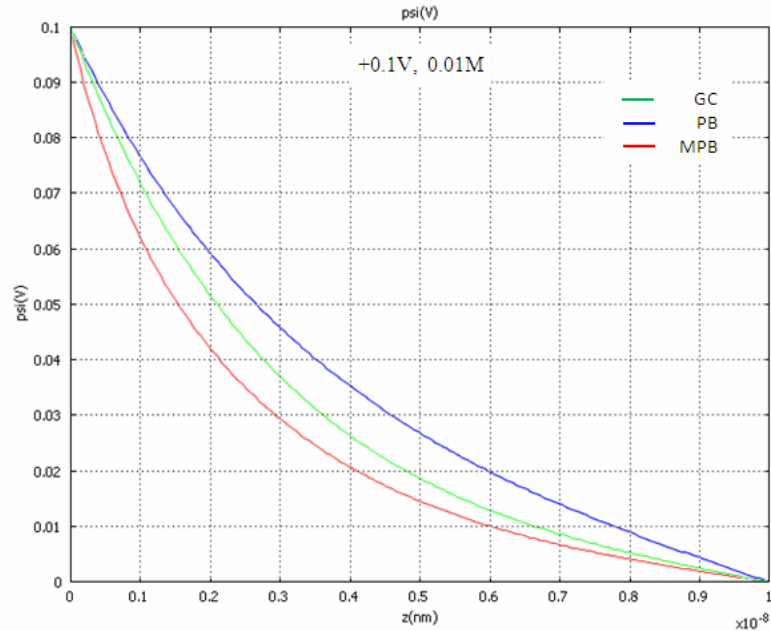


Figure III.14 Validation de l'équation MPB sur un cas quasi-linéaire (électrolyte $0.1V$, $0.01M$) par comparaison avec les solutions PB et GC.

Pour des tensions plus élevées ($+1 V$, voir figure III.15), le MPB et PB solutions ne se chevauchent plus parce que la validité de l'équation de PB échoue. L'équation MPB prévoit une largeur EDL beaucoup plus grande ($\sim 0,2 \text{ nm}$) que celle proposée par la solution PB ($\ll 0,01 \text{ nm}$). L'effet d'éviction à la surface chargée repousse les ions dans la couche diffuse et fournit une largeur d'EDL beaucoup plus grande que ce que l'équation de PB prédit.

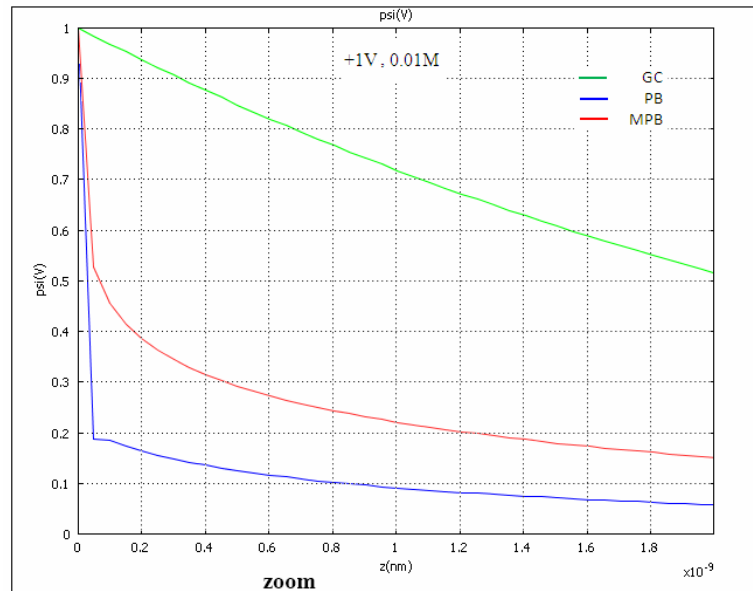
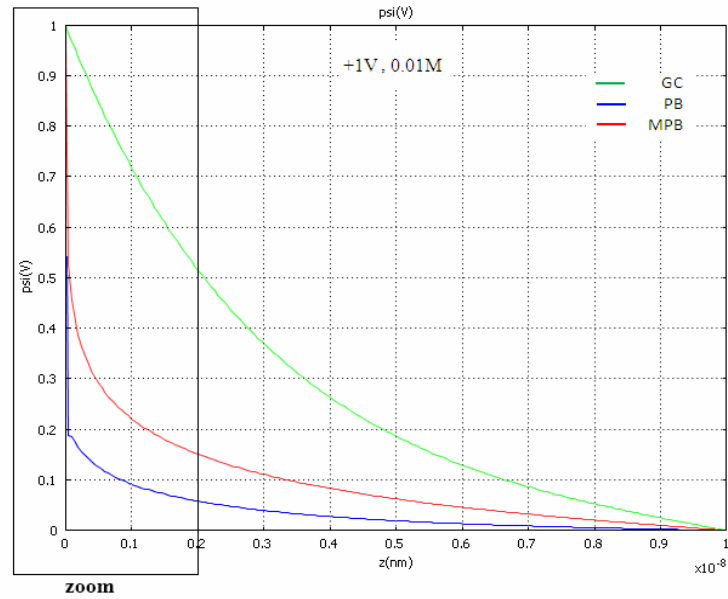


Figure III.15 solutions de PB, de MPB et de GC pour un électrolyte de concentration en volume de 0.01M et d'un potentiel du surface élevé (+1V). La figure au-dessous est un zoom de la supérieure près de la surface chargée.

V.6. La convergence de l'équation de PB et MPB

Les résultats numériques précédents prouvent que plus la tension de l'électrode Ψ_E est haute, plus les non linéarités du problème sont hautes. Pour obtenir une bonne convergence de la solution, plusieurs astuces sont employées. D'abord, le maillage est fortement raffiné près de la surface d'électrode où les gradients sont très raides. Le caractère unidimensionnel de la solution permet l'utilisation des éléments quadrilatéraux avec la qualité : la maille de ('mapped') a l'avantage de réduire rigoureusement le nombre d'éléments finis et ainsi le temps

de solution et les conditions de mémoire. En second lieu, des solutions précédentes obtenues à partir de la solution de GC et/ou avec des tensions appliquées inférieures ont été employées en tant qu'état de frontière.

V.7. Le couplage des équations MPB et de Navier-Stokes

Le problème que nous allons traiter ici s'inscrit dans la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles. On s'est attelé à résoudre un système de deux équations aux dérivées partielles elliptique non linéaire couplées entre elles, équation issues à la fois de la théorie de l'électrostatique, de la théorie de diffusion, et de la théorie de la micro fluidique (équation de Navier-Stokes). Notre but est de déterminer le potentiel Ψ ainsi que la distribution des porteurs de charge (ions dans le solvant) d'un électrolyte soumis à un potentiel. On se place dans l'hypothèse de régime permanent, c'est-à-dire que ces quantités ne varient pas avec le temps. Nous cherchons les équations qui les lient.

L'électro-osmose est le flux de fluide induit au-dessus d'une surface chargée par la dérive des charges mobiles d'EDL par le champ électrique. La convection des charges libres dans l'EDL peut engendrer leur dérive [42] conduisant à un faible couplage entre l'effort électrique et le flux de fluide.

Dans notre étude de la modélisation électro-osmose, l'approximation double couche mince sous le régime linéaire est utilisée pour l'EDL [43] - [44]. L'EDL est estimée à partir de la théorie de Debye-Hückel et n'est pas inclus à l'intérieur du domaine de calcul. Le champ électrique à l'intérieur du volume est calculé avec l'équation électrocinétique (III.28) et est relié à l'EDL à travers une condition limite de Neumann (III.30). Le mouvement du fluide est obtenu à partir de l'équation de Navier-Stokes (III.32) où la contrainte électrique agit comme une vitesse d'écoulement imposé comme condition aux limites sur la surface de l'électrode. Cette vitesse d'écoulement est estimée à partir des paramètres empiriques (la capacité du solvant et les couches diffuses) et la composante tangentielle du champ électrique donné par (III.28).

Notre but est d'enlever ces paramètres empiriques du modèle numérique. Cela suppose que l'EDL est entièrement représenté à l'intérieur du domaine de calcul pour le mouvement du fluide.

La difficulté numérique ici est le couplage multi-échelle qui doit être réalisé: l'EDL, qui est de l'ordre des dizaines de nm de large, doit être inclus dans un microsystème dont la taille atteint 1 μm

V.8. L'équations d'électro-osmose

Dans notre modèle numérique, nous utilisons l'équation de MPB afin d'estimer plus précisément les caractéristiques de l'EDL: la largeur EDL pour le calcul du champ électrique à l'intérieur de l'électrolyte et la densité de charge libre pour le champ de vitesse.

L'EDL est supposé être une capacité par unité de surface EDL C (C/m²) tels que:

$$C_{EDL} = \frac{\epsilon}{L_{EDL}} \quad (\text{III.27})$$

où L_{EDL} est la largeur EDL calculé à partir de l'équation de MPB (III.26).

Sous une certaine tension appliquée, le champ électrique à l'intérieur du volume (c'est-à-dire en dehors de l'EDL) est donné par l'équation électrocinétique suivante. pour les vrais diélectriques [11,12].

$$\bar{\nabla} \cdot (-\sigma \bar{\nabla} V) = 0 \quad (\text{III.28})$$

où σ est la conductivité apparente (S / m), V le potentiel électrique.

Sur les surfaces isolées en contact avec l'électrolyte, la condition limite associée à (III.28) est de type Neumann homogène:

$$\left(-\sigma \frac{\partial V}{\partial n} \right) = 0 \quad (\text{III.29})$$

n étant la normale extérieure.

Les électrodes chargées, qui sont supposés parfaitement polarisables (pas de réactions électrochimiques), la majeure partie est en contact avec l'EDL. L'équation (III.28) est liée à l'équation MPB à cette interface où la conservation de la densité normale de courant donne:

$$\left(-\sigma \frac{\partial V}{\partial n} \right) = C_{EDL} \Delta \psi_{EDL} \quad (\text{III.30})$$

$\Delta \psi_{EDL}$: est la chute de potentiel à travers l'EDL

$$\Delta \psi_{EDL} = \psi_E - V \quad (\text{III.31})$$

L'écoulement du fluide est obtenu à partir de l'équation de Navier-Stokes où les effets de Joule sont censés être négligeables:

$$\vec{\nabla} p - \eta \nabla^2 \vec{V} + \rho_m (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} = \langle \vec{F}_E \rangle \quad (\text{III.32})$$

ρ est la masse volumique du liquide est (1000 kg/m³ pour l'eau) et η la viscosité dynamique (10-3kg/m/s pour l'eau). Puisque les nombres de Reynolds sont très faibles dans les microsystemes [45], le terme d'inertie est généralement très faible en l'équation (III.32).

F est la force électrique due à l'interaction du champ électrique à courant alternatif avec les charges libres de l'EDL. Dans l'hypothèse où la permittivité du fluide est uniforme (ce qui n'est pas généralement le cas pour la haute tension [46]):

$$\langle \vec{F}_E \rangle = \frac{1}{2} q (\vec{E}) \quad (\text{III.33})$$

où q est la de densité charge libre à l'intérieur de l'EDL défini par (III.34) et calculée à partir du terme source de l'équation de MPB (III.26). Comme l'équation MPB ne concerne que la couche diffuse de l'EDL, la limite au-dessus des électrodes pour l'équation (III.32) représente l'interface entre la couche compacte et la couche diffuse: la condition limite de type Dirichlet, ce qui équivaut à l'état de non perméabilité, est utilisé à cette interface (voir figure III.16):

$$\vec{V} \cdot \vec{n} = 0 \quad (\text{III.34})$$

VI. Résultat de la modélisation de la partie électrochimique du capteur :

VI.1. Paramètres Numériques

L'électrolyte est représenté en une géométrie à 2D et nous considérons ici: la largeur des électrodes de 22 nm. L'épaisseur de l'électrolyte au-dessus du plan des électrodes est d'environ 22 nm. L'électrolyte est une solution aqueuse avec des ions H_3O^+ et OH^- de la conductivité 2,1 ms / m (électrolyte), la concentration en volume est de $1.4 \cdot 10^{-4}$ M [47].

Le schéma de la figure III.16 résume la façon dont les couplages entre les équations sont fait dans notre modèle électrocinétique : l'équation de MPB (bleu) est retrouvé sur une géométrie 1D, largeur de l'EDL L_{EDL} est calculée à partir du potentiel 1D en utilisant les variables de couplages d'intégrations, la formule (III.30) est utilisé pour la condition aux limites. La densité de charge libre (III.26) est extrudée à partir de la géométrie 1D dans la géométrie 2D pour la résolution de l'équation de Navier-Stokes (rouge).

Les électrodes schématisées ici par les zones hachées en noires ne sont jamais prise en considération dans les domaines de calcul.

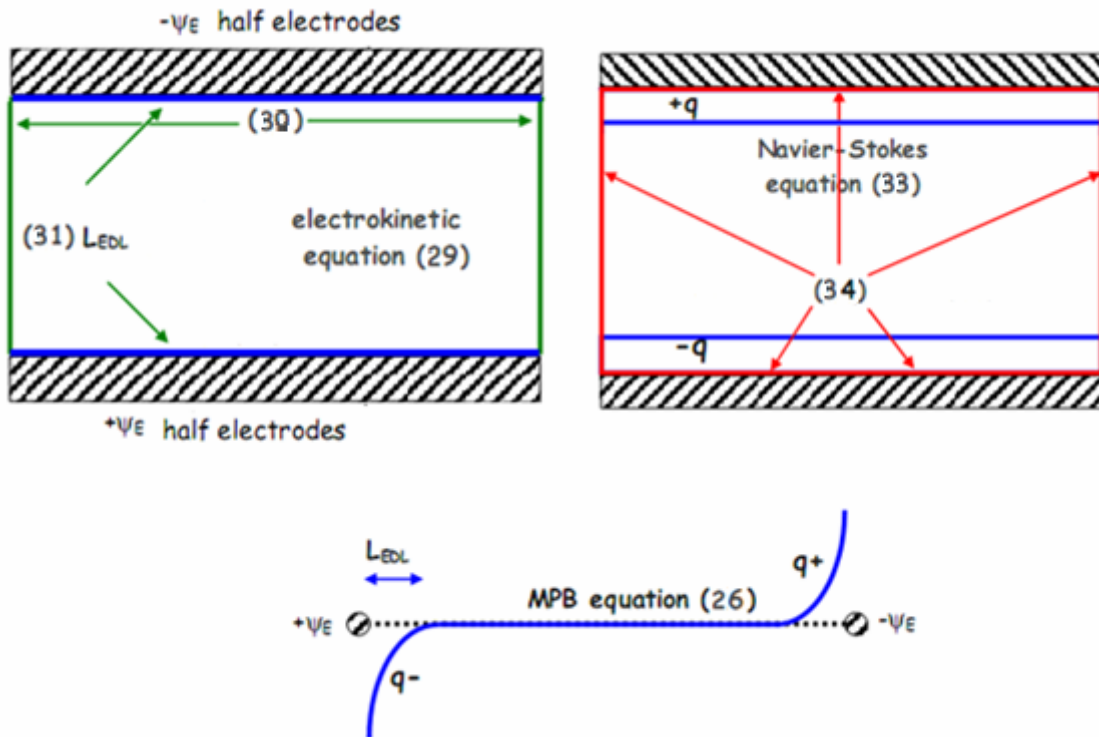


Figure III.16 Couplage des équations du modèle électrocinétique.

VI .2. Résultats Numériques

Nous donnons dans ce qui suit les résultats numériques obtenus avec le modèle électrocinétique décrites précédemment, pour le cas $\Psi_E = \pm 0.1V$.

Sur la figure (III.17), le potentiel électrique est représenté en fonction de la largeur de l'électrolyte. En regardant la valeur maximale du potentiel, nous pouvons voir que, presque tout le potentiel est à l'intérieur de l'EDL la majeure partie de l'électrolyte se trouve seulement à un potentiel de 0.04V par rapport à la valeur des électrodes qui est 0.1V: une grande partie de la chute de potentiel électrique se produit à l'intérieur de l'EDL.

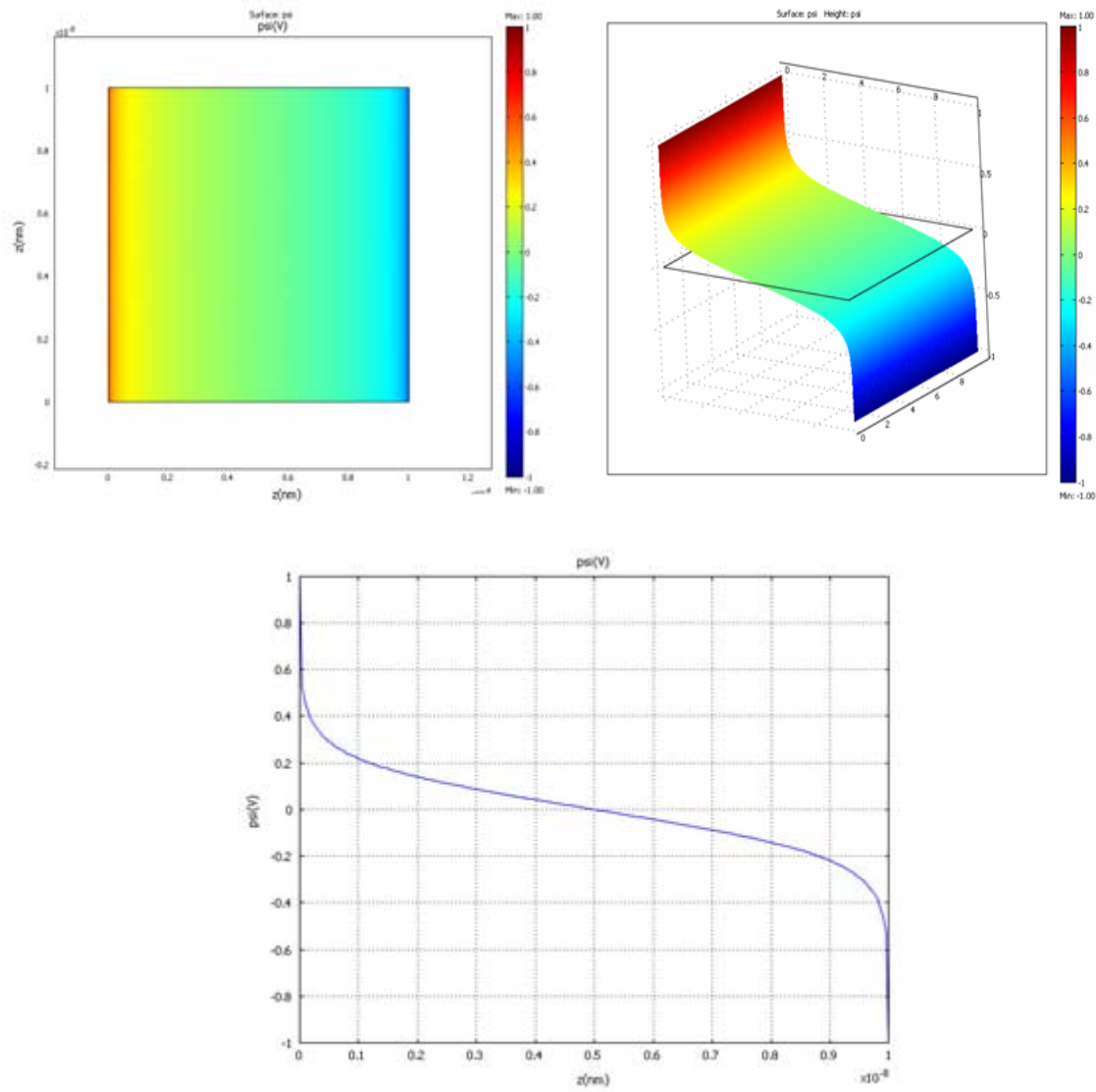


Figure III.17 potentiel $\Psi(V)$ et les vecteurs de champ électrique à l'intérieur de l'électrolyte pour $\Psi_E = \pm 1$ V,

Nous proposons ici un modèle numérique mis en œuvre dans Comsol Multiphysics pour la modélisation des phénomènes électro-osmose. Dans ce modèle, les paramètres empiriques ne sont pas nécessaires pour calculer le champ électrique ainsi que l'activité des ions et la vitesse d'écoulement. La validation analytique de l'équation PB et sa comparaison avec l'équation MPB proposée par Kilic et al [41] à de faibles tensions montrent que Comsol Multiphysics nous permet de gérer facilement l'aspect fortement non linéaire de ces équations. Le faible couplage entre l'équation 1D MPB avec l'électrocinétique 2D et des équations de Navier-Stokes a été calculé sur un microsystème avec deux électrodes proposé par Green. Les résultats numériques semblent être en bon accord avec les résultats de Green [48].

Au début de notre étude nous avons choisi de modéliser notre capteur pH-ISFET en le décomposant en deux parties et de modéliser chaque partie indépendamment de l'autre, cela nous a permis de comprendre les phénomènes dans chaque partie ainsi que la physique régissant ce phénomène. Le problème est qu'il nous fallait à chaque fois imposer un potentiel constant à la surface du MOS en contact avec l'oxyde et aussi à la surface de l'électrolyte, ceci n'est pas envisageable si nous voulons simuler la réponse du capteur juste en introduisant la concentration en ions H^+ . Il nous a fallu donc fusionner entre ces deux parties et imposer un seul potentiel V_{gs} entre l'électrode de référence et le substrat, pour avoir une réponse du capteur qui soit plus proche de la réalité.

VII. Couplage des différentes parties du capteur

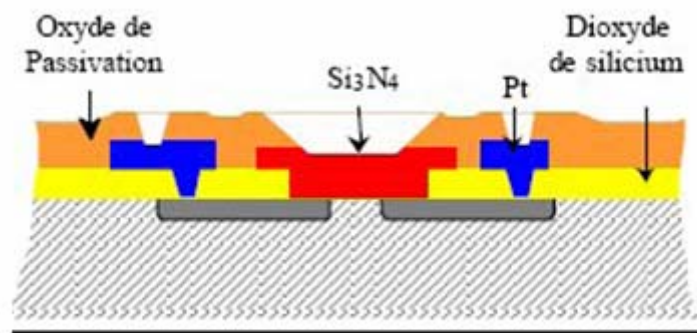


Figure III.18 vue du pH-ISFET à modélisé [35]

L'ISFET sujet de notre étude est l'un des ISFET du système multi microcapteurs ISFET de silicium - qui a été fabriqué au « *Centre Nacional de Microelectrònica (IMB-CSIC) Barcelone / Espagne* [4] » sous forme d'aiguille, comprenant deux micro-capteurs ISFET, une pseudo-électrode de référence (Pt) et un capteur de température. Ces multi micro-capteurs de nouvelle génération sont utilisés pour la détection de l'ischémie myocardique pendant la chirurgie cardiaque et aussi pour d'autres applications biomédicales, développé spécialement sous forme d'aiguille pour la mesure simultanée des concentrations des ions K^+ , H^+ et de la température sur le tissu myocardique pendant la chirurgie cardiaque [35].

VII.1. Paramètres Numériques

Les multi micro-capteurs ont été fabriqués sur des substrats de silicium de type p, avec une orientation $\langle 100 \rangle$ et une résistivité qui varie de 4 à 40 $\Omega \cdot \text{cm}$ et qui correspond à un niveau de dopage de 10^{15} cm^{-3} et NMOS $W/L = 400\mu\text{m}/20\mu\text{m}$

La grille de l'ISFET est formée d'une couche d'oxyde de silicium d'épaisseur 800 Å et est recouverte d'une couche de nitrure de silicium de 1000 Å. Expérimentalement le nitrure de silicium est meilleur que l'oxyde de silicium en termes de sensibilité au pH, linéarité de la réponse et de temps de vie [35].

VII.2. Résultats numériques

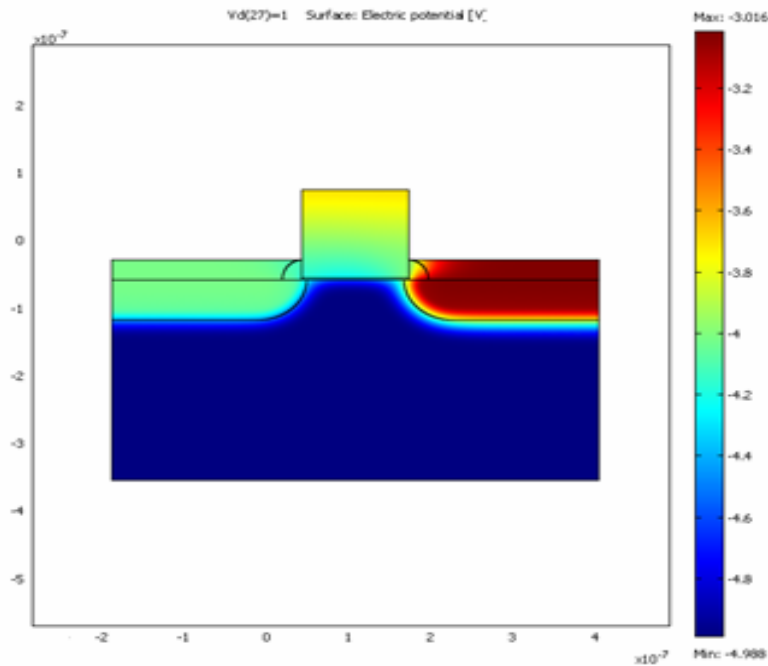


Figure III.19 : variation de potentiel dans le capteur pH-ISFET

Nous observons sur la figure (III.19), que le potentiel est répartie dans les trois régions du capteur et est maximale à la surface de l'électrolyte en contact avec l'électrode de référence puis un peu moins dans l'oxyde et en contact avec le canal et diminue en s'éloignant de celui-ci vers le substrat. Le potentiel augmente de la source vers le drain et atteint sa valeur maximale de côté drain où le potentiel de surface prend la valeur $\varphi_s = 0,39 \text{ V}$ indiquant l'établissement du régime de forte inversion. Cette valeur de φ_s obtenue sera utilisée par la suite afin de définir la tension de seuil de l'ISFET

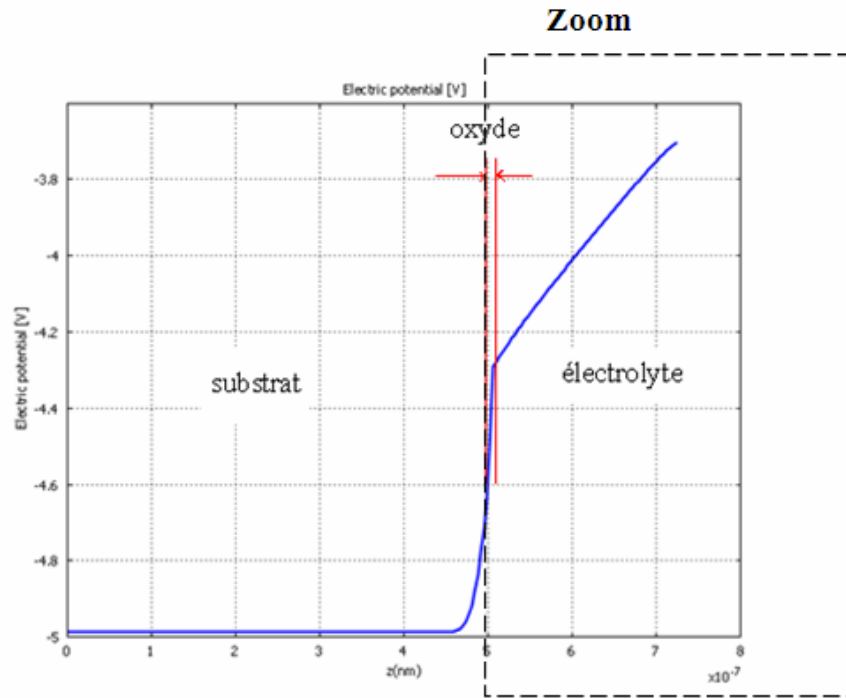
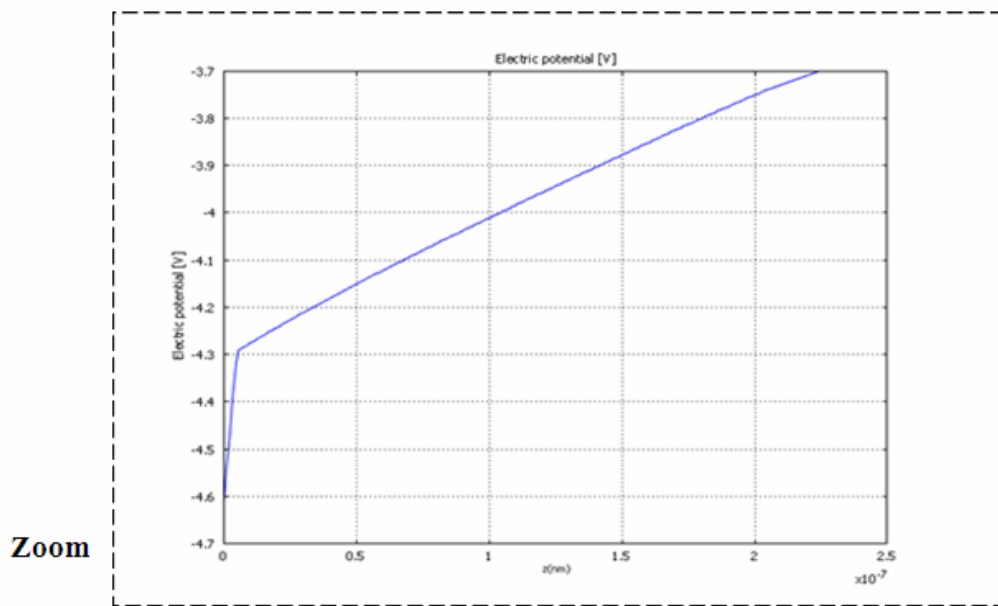


Figure III.20: la variation de potentiel dans une section du capteur pH-ISFET

Figure III.21: la variation de potentiel dans une section du capteur pH-ISFET
(Oxyde SiO_2 + Electrolyte)

Les figures (III.20) et (III.21) montrent d'une part que le potentiel à l'interface oxyde/électrolyte demeure constant le long du canal, alors qu'il augmente d'autre part à travers l'électrolyte en s'éloignant de l'interface oxyde/électrolyte.

VII.3. Caractéristiques électriques de L'ISFET

Le comportement électrique du capteur ISFET a été étudié pour une solution neutre (pH=7). Les caractéristiques électriques I_{ds} de V_{ds} à V_{gs} constant sont représentées sur la figure (III.22)

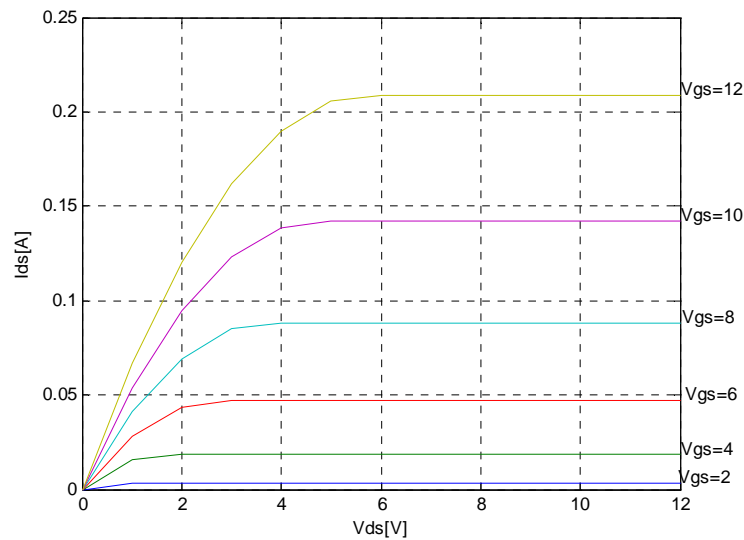


Figure III.22. : Caractéristique I_{ds} en fonction de V_{ds} à V_{gs} constant

Les caractéristiques électriques de transfert I_{ds} de V_{gs} à V_{ds} constant sont représentées sur la figure (III.23) pour différentes valeurs du pH.

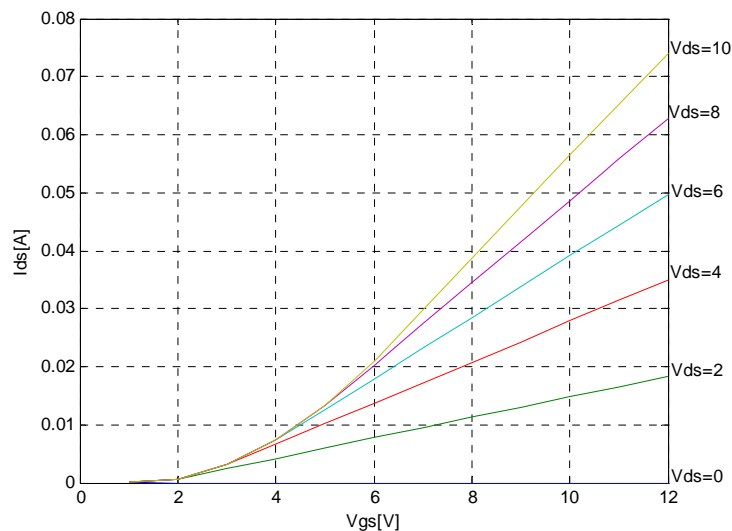


Figure III.23 : Caractéristique I_{ds} en fonction de V_{gs} à V_{ds} constant

Les figures (III.22) et (III.23) montrent que les caractéristiques du capteur ISFET sont similaires à celles du transistor MOSFET.

VII.4. Sensibilité du capteur

La caractéristique de transfert I_{ds} en fonction de V_{gs} à V_{ds} constante fait apparaître la liaison entre la tension grille-source V_{gs} et le pH de la solution, pour mesurer l'activité des ions, on utilise soit le régime linéaire de fonctionnement de l'ISFET, soit le régime de saturation du fait que la sensibilité au pH ne dépend pas significativement du courant I_{ds} traversant le capteur.

Afin d'estimer la sensibilité du capteur à l'ion H^+ , nous avons effectué une analyse dans trois solutions tampons avec des $pH = [2, 7, 9]$, à température ambiante. Les caractéristiques que nous avons tracées sont des courbes $I_{ds}(V_{gs})$. La détermination de cette sensibilité se fait pour des valeurs fixes du courant I_{ds} et de la tension V_{ds} . La valeur de la tension V_{gs} qui en résulte donne alors la mesure du pH. Cette valeur est ensuite reportée sur un graphe en fonction du pH.

La sensibilité est donnée par l'équation (III.35), représentant la pente de la courbe donnant V_{gs} en fonction du pH.

$$S = \left| \frac{dV_{gs}}{dpH} \right| = \frac{KT}{q} \frac{\beta}{\beta + 1} \ln 10 \quad (III.35)$$

Pour les paramètres de notre modèle, la sensibilité est quasi Nernstienne $S=54.7mV/PH$

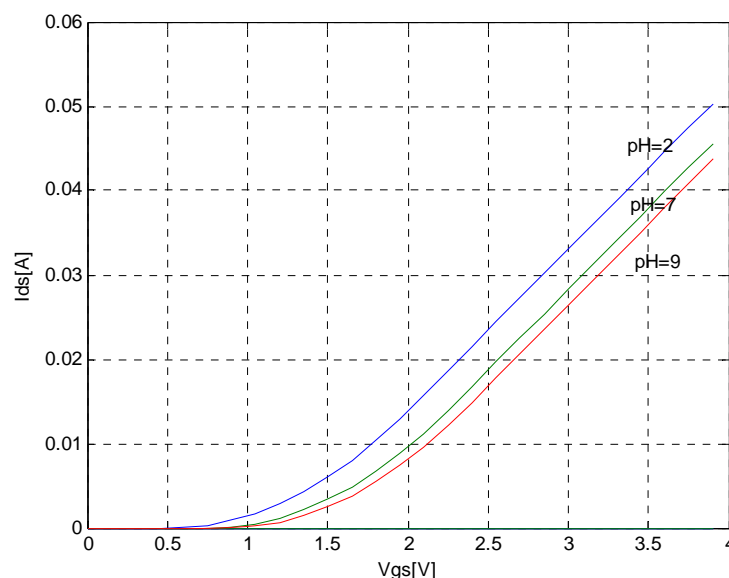


Figure III.24 : Réponse d'un ISFET dans trois solution tampon de pH (I_{DS} de V_{GS} à $V_{DS}=1.5V$)

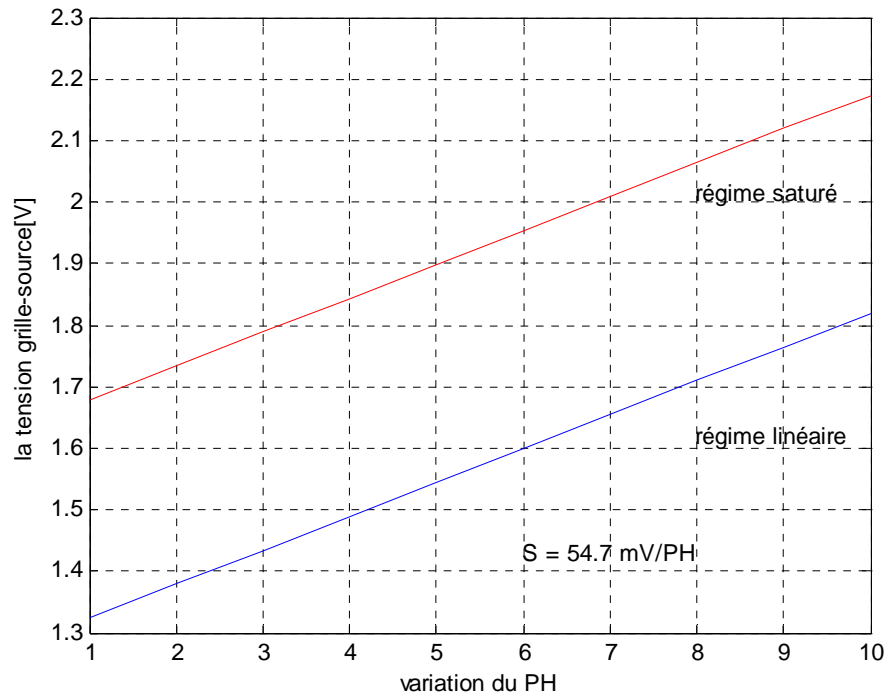


Figure III.25 : La sensibilité du capteur ISFET

VIII. Interprétation

Nous observons d'abord l'accroissement du potentiel avec l'augmentation des valeurs du pH. La réponse du capteur PH-ISFET à la variation du pH est expliquée en utilisant le model du « site binding » qui décrit le mécanisme des charges d'un oxyde à l'équilibre entre les groupements OH (par exemple le silanol Si-OH) de surface et les ions H^+ de la solution, couplé avec le model de Gouy-Chapman-Stern du potentiel de surface dans l'électrolyte, (décrit au Chapitre I)

En effet, les groupements OH existant à la surface de l'oxyde agissent comme des sites amphotères lorsque ils sont en contact avec un électrolyte. C'est-à-dire qu'ils peuvent être neutres, donneur de protons, ou accepteur de protons.

Dans la solution de pH=2, les sites récepteurs de la surface attachent les ions H_3O^+ à cause de leurs concentrations élevée dans la solution (acide fort), à l'équilibre thermodynamique l'interface oxyde/ électrolyte est donné par l'équation suivante :



La différence entre la concentration des ions H^+ dans l'électrolyte et en surface crée un potentiel Ψ_0 , qui atteint sa valeur maximale à l'interface $\Psi_{0\text{max}} = 0.36\text{V}$. Si le pH augmente, et reste inférieur à 7 (acide faible), la concentration des ions H^+ diminue dans l'électrolyte et reste maximal à l'interface, en effet la diminution de la concentration des ions H^+ dans l'électrolyte avec l'augmentation du pH, induit une augmentation du potentiel.

Pour le cas d'une solution neutre (pH=7), les ions H_3O^+ et OH^- sont accumulés à la surface de la couche sensible, la diminution de la concentration des H^+ conduit à une augmentation du potentiel, qui prend sa valeur maximale à l'interface $\Psi_{0\text{max}} = 0.66\text{V}$.

Dans la solution 3 de pH = 9 (une base), les sites amphotères de la surface attachent les ions OH^- parce que leur concentration est supérieure à celle des ions H_3O^+ , la réaction chimique à l'interface devient :



La concentration des ions H^+ dans la solution est faible et est forte à l'interface ($K_a = 15.8$), donc la différence de potentiel entre la surface et l'électrolyte devient importante et le potentiel ψ_0 augmente, dans ce cas $\psi_0 = 0.78\text{V}$. Si on augmente encore le pH (base forte), le potentiel ψ_0 prend des valeurs maximales.

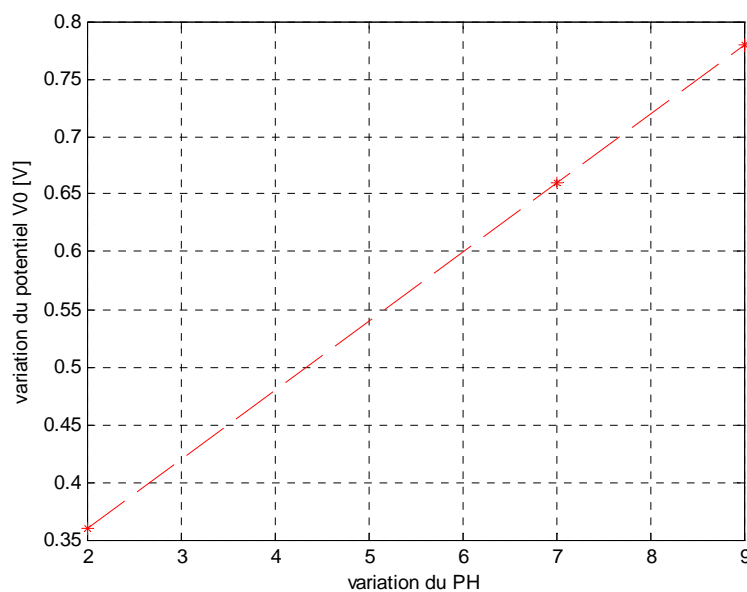


Figure (III.26) : Variation du potentiel ψ_0 en fonction du pH de la solution

Finalement, nous avons prouvé que le potentiel ψ_0 dépend de l'acidité du milieu et varie linéairement avec le pH, cette variation provoque un décalage de la tension de seuil du capteur ISFET suivant l'équation (III. 38) :

$$V_T (\text{ISFET}) = E_{\text{ref}} + \psi_0 + \chi_{\text{sol}} - \frac{\phi_{\text{Si}}}{q} - \frac{Q_{\text{ox}} + Q_{\text{ss}} + Q_{\text{b}}}{C_{\text{ox}}} + \phi_s \quad (\text{III.38})$$

Tous les paramètres de l'équation (III.38) peuvent être fixés à l'exception du potentiel ψ_0 lié à l'acidité de la solution à analyser.

Sachant que V_{gs} est donnée par :

$$V_{\text{gs}} = V_T + \frac{I_{\text{ds}}}{KV_{\text{ds}}} + \frac{V_{\text{ds}}}{2} \quad (\text{III.39})$$

La tension V_{gs} varie linéairement avec la tension de seuil V_T et donc avec les variations de PH, la détermination de la sensibilité des capteurs se fait aux valeurs fixes du courant I_{ds} et de tension drain-source V_{ds} . La variation de la tension grille-source V_{gs} est reliée dans ce cas uniquement à la variation de V_T dépendant de la variation du pH.

IX. Implantation de la membrane Si_3N_4

Dans le modèle que nous avons proposé il existe beaucoup de paramètres qui peuvent influencer sur la réponse du capteur et de ce fait sur sa sensibilité en commençant par la géométrie du dispositif la longueur du canal en particulier, les niveaux de dopage ainsi que les matériaux semi-conducteurs et les isolants utilisés.

Le choix de l'isolant et de la membrane ionosensible a attiré particulièrement notre attention. Effectivement de nombreuses membranes sensibles aux ions hydrogène (généralement ce sont des matériaux non-organiques [3,15]) ont été élaborées afin d'améliorer la sensibilité, la sélectivité, la stabilité et la durée de vie. Notons les principales le nitrure de silicium (Si_3N_4) sensibles aux ions hydrogène et ses caractéristiques : court temps de réponse,

un faible courant de fuite due a sa constante diélectrique deux fois supérieur à celle du SiO_2 , et une sensibilité quasi-Nernstienne (autour de 50 - 56 mV/pH) cela est due principalement au nombre de sites amphotères N_s en surface de l'isolant Si_3N_4

Ces sites sont responsables des réactions chimiques entre les ions et la membrane. En effet cette variation provoque une variation du coefficient de sensibilité β selon l'équation suivante :

$$\beta = \frac{2N_s q^2}{\left(\frac{k_a}{k_b}\right)^{0.5} C_D K T} \quad (\text{III.40})$$

Nous avons pu améliorer notre modèle en introduisant ce paramètre nous avons pu ainsi simuler l'activité des ions H^+ près de la surface de l'électrolyte en contact avec la membrane. D'après une recherche sur les site amphotère réalisé par Bartic et al[15], le nitrure de silicium Si_3N_4 a un nombre de site amphotère 1,5 fois plus grand que celui de l'oxyde de silicium SiO_2 .

La figure (III.27) représente la réponse d'un ISFET avec une membrane Si_3N_4 .

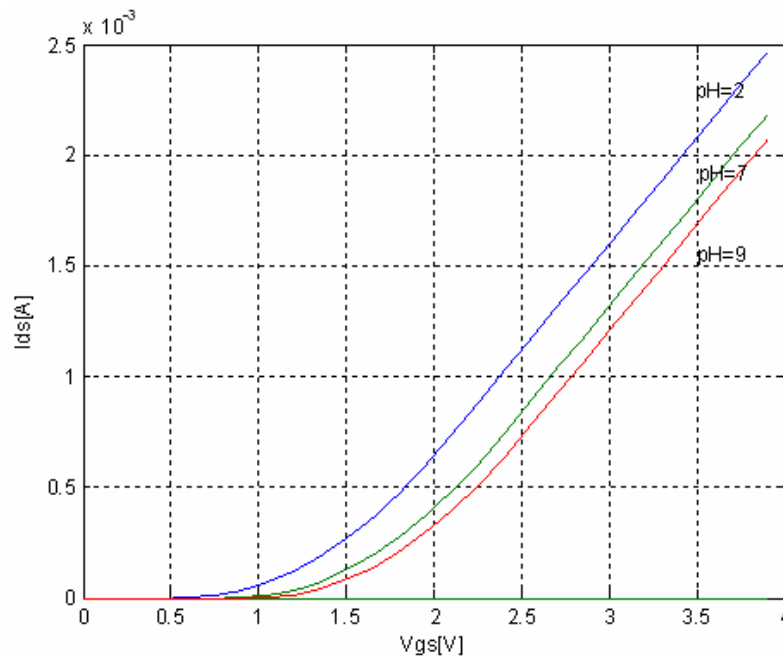


Figure III.27.: Réponse d'un ISFET dans trois solution tampon de pH (I_{DS} de V_{GS} à $V_{DS}=1.5V$)

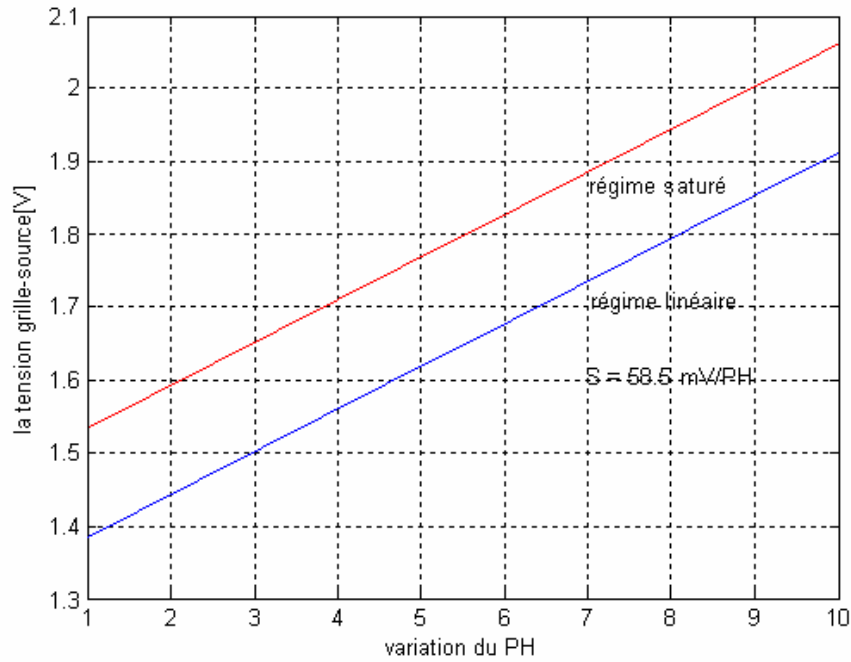


Figure III.28 : La sensibilité du capteur ISFET avec une membrane de Si_3N_4

Pour la membrane de nitrure de silicium, la sensibilité est quasi Nernstienne = 58.5 mV/ PH, et est la même pour les deux régimes de polarisation. L'intégration du coefficient β nous a permis d'avoir une sensibilité du capteur un peu plus grande que celle retrouvée expérimentalement pour les membranes Si_3N_4 mais néanmoins plus approchante.

X. CONCLUSION

Nous avons présenté à travers ce chapitre, la modélisation d'un capteur ISFET par la méthode des éléments finis. Ceci a nécessité d'une part la modélisation numérique du transistor MOSFET et d'autre part la modélisation numérique de l'électrolyte. Un intérêt particulier a été consacré à l'étude de la sensibilité du capteur en fonction de la membrane ionosensible utilisée.

En effet, les résultats ont montré une meilleure sensibilité du capteur à base d'une membrane en Si_3N_4 , que celle obtenue par utilisation d'une membrane en SiO_2 .

CHAPITRE IV
SIMULATION DES CIRCUITS DE MESURE
DE pH POUR ISFET

I. Introduction

Les études bibliographiques consacrées au développement des micro-capteurs chimiques ChemFETs montrent que les travaux de recherche et de développement sont dirigés essentiellement vers l'utilisation de nouvelles membranes et vers l'amélioration de leurs caractéristiques de fonctionnement (voir chapitre I). Ces derniers exigent l'optimisation de leur fabrication technologique.

Néanmoins, les moyens traditionnels utilisés dans le cadre du traitement du signal des ChemFETs, c'est-à-dire les circuits élémentaires de conversion courant - tension, n'atteignent pas les performances recherchées par l'utilisateur. En effet, ils sont sensibles aux variations thermiques et lumineuses et présentent généralement un niveau considérable de charge ainsi que des phénomènes parasites de polarisation... Il convient donc de développer de nouvelles techniques de mesure de la tension de sortie des capteurs ChemFETs afin d'optimiser leurs qualité de détection. Ces techniques possèdent un caractère générique et peuvent donc être appliquées aux différents types de capteurs ChemFETs (détectons: pH, pNH₄, pNO₃, pCa...).

Dans ce chapitre nous allons présenter le macro-modèle de l'ISFET. Effectivement en utilisant le modèle du pH-ISFET développé au chapitre III avec le logiciel Comsol Multiphysics 3.5a, nous pouvons grâce à une interface qu'offre Comsol avec le logiciel PSpice Orcad 14.2, extraire le modèle du capteur vers une netlist de PSpice et créer alors un composant de bibliothèque PSpice, nous simulerons le fonctionnement du capteur sous différent circuits qui peuvent être associés à un pH-ISFET pour la détection et la mesure de l'activité ionique d'une solution, nous présenterons ainsi les avantages et les inconvénients de chacun de ces circuits.

Ensuite le composant ISFET implémenté sur le simulateur PSPICE, sera utilisé dans une circuiterie que nous proposerons pour la mesure du décalage de la tension de seuil (la sensibilité) du capteur émergé dans la solution de pH à analysée que nous envisageons de réaliser dans des travaux à venir d'un banc de mesure pour la caractérisation du capteur étudié. Ceci afin de valider expérimentalement les résultats obtenus dans le chapitre précédent.

II. Instrumentation des ISFETs

Au début du développement des micro-capteurs chimiques ChemFETs, l'estimation de l'activité d'ions dans une solution s'est faite par la mesure du courant drain-source I_{ds} en fixant la tension V_g sur l'électrode de référence [49]. Mais cette méthode n'est pas précise et ne donne pas directement la valeur du potentiel électrochimique qui est lié à la concentration ionique de la solution. Donc, plus tard, il a été proposé de travailler avec des valeurs fixes du courant drain-source I_{ds} et des tensions drain-source V_{ds} . Cette méthode impose l'introduction dans le circuit d'une contre-réaction. Elle peut être appliquée soit sur l'électrode de référence, soit sur le drain du capteur ChemFET. Ainsi, la variation du potentiel électrochimique est directement mesurée soit sur l'électrode de référence, soit sur la source du capteur ChemFET. Cependant, la contre-réaction appliquée sur l'électrode de référence entraîne deux inconvénients: d'un côté ce système nécessite une référence pour chaque ISFET ce qui limite les possibilités de multi-détection et, d'autre part, la solution ne doit pas être mise accidentellement à la masse. Le mode de fonctionnement couramment utilisé jusqu'à maintenant dans la plupart des ChemFETs – mètres consiste à suivre les variations sur la source du ChemFET en mettant l'électrode de référence à la masse [50]. Le fait d'utiliser une référence commune à plusieurs ChemFETs permettra l'application de la mesure différentielle et aussi l'intégration de multicapteurs intégrés. Les grilles de tous les capteurs seront au même potentiel électrique, celui de la solution, et chaque capteur aura son propre circuit de polarisation.

Pour mesurer l'activité des ions dans le milieu à analyser, le schéma électrique doit assurer le fonctionnement stable des capteurs ChemFETs, et donc d'avoir la possibilité d'ajuster les valeurs du courant drain-source I_{ds} et de la tension drain-source V_{ds} [51].

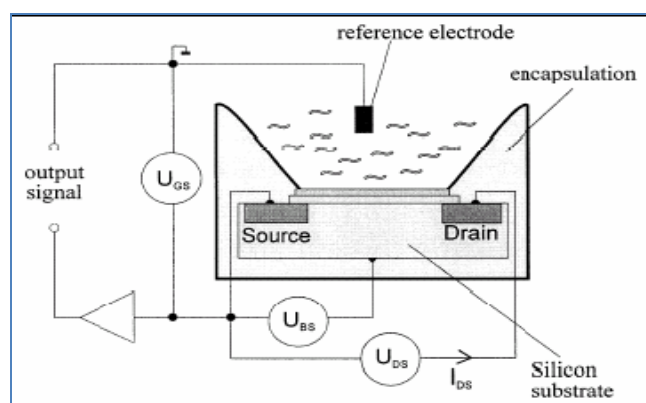


Figure IV.1: Esquisse d'un ISFET avec une électrode de référence et les connexions électriques

III. Méthodes de mesure du potentiel électrochimique

Les circuits élémentaires de mesure du potentiel électrochimique sont présentés sur la figure IV.2. Dans le schéma IV.2 (a), le courant drain-source I_{ds} et la tension drain-source V_{ds} ne sont pas fixés et la tension de sortie U_{out} dans la zone linéaire s'écrit sous la forme suivante:

$$U_{out} = K(V_{gs} - V_T) - \frac{1}{R} \left(1 \pm \sqrt{\left(1 - RK(V_{gs} - V_T) \right)^2 - 2ER} \right) \quad (IV.1)$$

La figure IV.2 (b) montre la plus simple méthode d'améliorer la précision de mesure de la tension de seuil du ChemFET. Elle consiste à relier l'électrode de référence avec le drain du capteur, donc $V_{ds} = V_{gs}$. Dans ce cas on détermine la tension de sortie en régime saturé U_{out} comme:

$$U_{out} = V_T + \frac{\sqrt{1 + 4RK(E - V_T)} - 1}{2RK} \quad (IV.2)$$

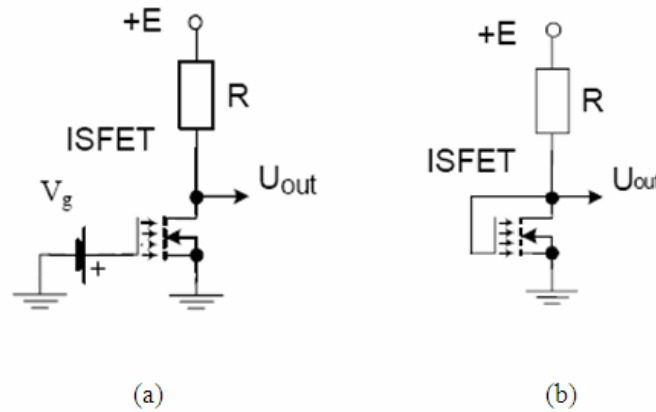


Figure IV.2: Schémas typiques de mesure

Pour les deux schémas, l'étude de U_{out} permet à priori de déterminer la tension de seuil du capteur V_T . Néanmoins, ces méthodes exigent des opérations mathématiques relativement complexes, ce qui est assez problématique pour un capteur élémentaire.

Les caractéristiques théoriques des ChemFETs sont très similaires de celles d'un transistor à effet de champ. Ce n'est pas le cas en réalité, les résistances parasites de la source (R_s) et du drain (R_d) influent fortement sur les caractéristiques du ChemFET, mais la résistance du canal a également une importante influence (figure 3.6). En effet, celle-ci, à la différence du transistor à effet de champ, est assez élevée (100 Ohm et plus). La capacité parasite est de quelques dizaines de picofarads et doit être incluse dans le modèle du capteur ChemFET [52]. La longueur typique du canal d'un ChemFET est de quelques dizaines de

microns. En outre, la dérive thermique des caractéristiques du ChemFET est considérable et elle doit être prise en compte pendant le traitement du signal électronique.

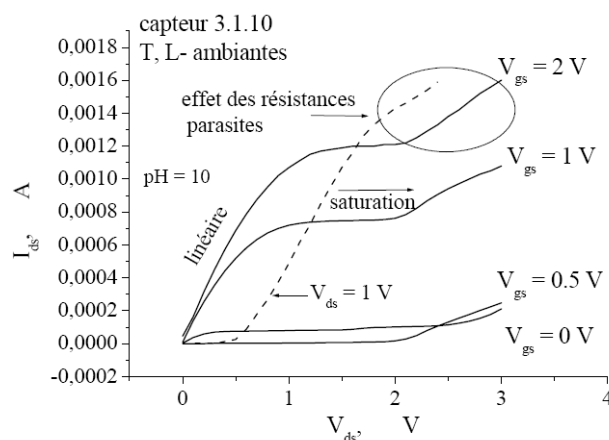


Figure IV.3: Influence des résistances parasites du drain (R_d) et de la source (R_s)
Sur la caractéristique $I_{ds}(V_{ds})$ d'un ChemFET

Les schémas électriques sur lesquels est basée la détermination du courant drain source I_{ds} du ChemFET ne permet pas de mesurer assez précisément la variation de la tension de seuil du capteur. Par exemple, dans le régime saturé du ChemFET à $V_{gs} = 1\text{ V}$ la réponse du capteur est autour de $-8.4\text{ }\mu\text{A/pH}$ [53].

IV. Quelques circuits de mesure

Toute mesure de grandeurs physiques, chimiques, biologiques... par un système de détection sont soumise à des facteurs d'influence qui viennent perturber la réponse du capteur. Dans ces conditions, il est nécessaire de s'affranchir, autant que faire se peut, des perturbations engendrées par ces grandeurs. C'est pour cela que l'instrumentation de mesure fait appel à des circuits complexes et notamment, des circuits différentiels qui permettent d'éliminer les effet indésirable tels que ceux de la température, de la lumière, de la dérive temporelle...[54, 55, 56].

En outre, dans le cas des capteurs chimiques ChemFETs, la sensibilité et la sélectivité du capteur dépendent fortement des propriétés de la couche sensible. Bien évidemment, trouver un matériau qui soit sensible à un seul type d'ion n'est pas une chose aisée et de nombreux travaux se sont ainsi tournés vers l'utilisation et le développement de circuits différentiels afin d'améliorer la sensibilité et la sélectivité des capteurs ChemFETs ainsi que de réduire les effets non souhaitables.

IV.1. Circuit de type pont avec diode Zener

La configuration de type pont de la figure IV-6 contient un pont de résistance et une diode Zener avec l'électrode de référence portée à la masse. L'avantage de ce circuit est dans son électrode de référence portée à la masse Ref, donc une seule électrode de référence est nécessaire pour un système de détection multi-ISFET. Ce montage peut fonctionner sur une large gamme d'opérations ce qui le rend adaptable aux ISFET dont les caractéristiques sont inconnues. L'inconvénient de ce circuit consiste dans la difficulté d'intégration par la technologie CMOS standard de la diode Zener à des microsystèmes à base d'ISFETs.

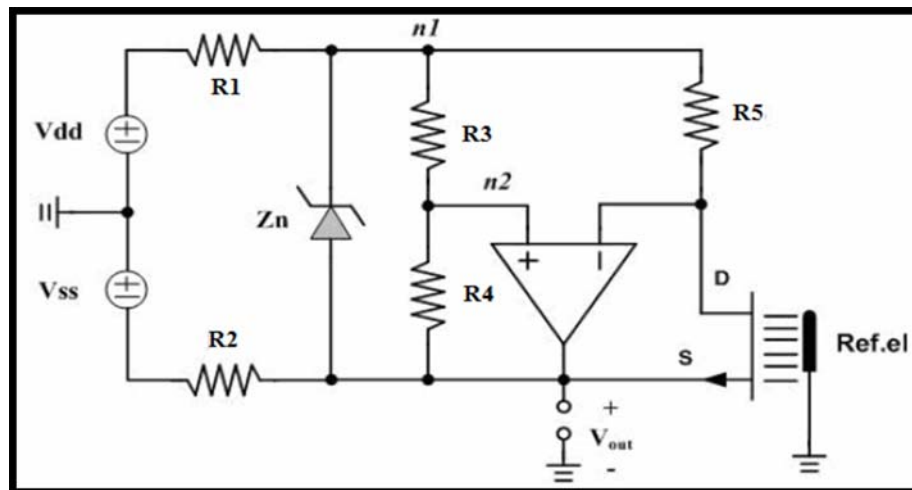


Figure IV.4 Circuit de détection de type pont a basse de diode Zener

IV.2. Circuit de type pont avec source de tension band-gap :

Un autre circuit a été proposé par Pechstein [57] dans la figure IV.5 similaire au montage en pont de mesure précédent. Ce circuit comporte une source de tension bande-gap UBG stable en termes de dérive thermique et la sortie est mesurée entre le drain et l'électrode de référence. Il présente aussi deux inconvénients :

- a- l'ISFET serve comme dispositif d'entrée, ainsi la résistance du drain R_{DS} du transistor ISFET est une résistance d'entrée pour l'amplificateur opérationnel.
- b- le potentiel du drain est mesuré mais il n'est pas bloqué à la sortie du montage.

Ces deux inconvénients rendent le gain de l'amplificateur sensible aux effets de l'environnement causé par la polarisation et par les solutions.

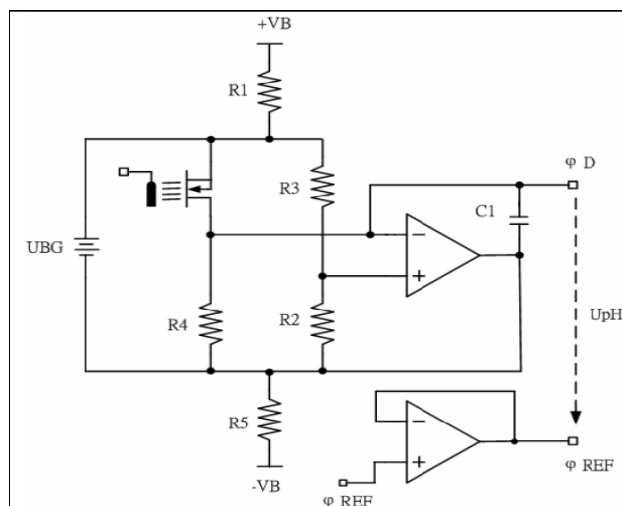


Figure IV.5 Circuit de type pont de Pechstein [57].

IV.3. Circuit de mesure à base de pont de Wheatstone

En 2004 Arkadiy Morgenshtein [58] a proposé une nouvelle interface de mesure de la sortie du dispositif (read out circuit) à base de pont de Wheatstone. Le circuit est capable de travailler en mode différentiel, et il permet l'intégration sur circuit (SOC), ainsi il apporte une compensation de l'effet de la température et une mesure par une paire ISFET/REFET (transistor de référence à grille métallique dont les caractéristiques sont identiques avec celles de l'ISFET). La figure IV.6 montre l'interface de mesure (readout circuit) à base de pont de Wheatstone :

Les tensions externes V2, V3 et V4 sont appliquées pour maintenir le pont en équilibre.

- Une partie du circuit ne fonctionne pas en mode CVCC.

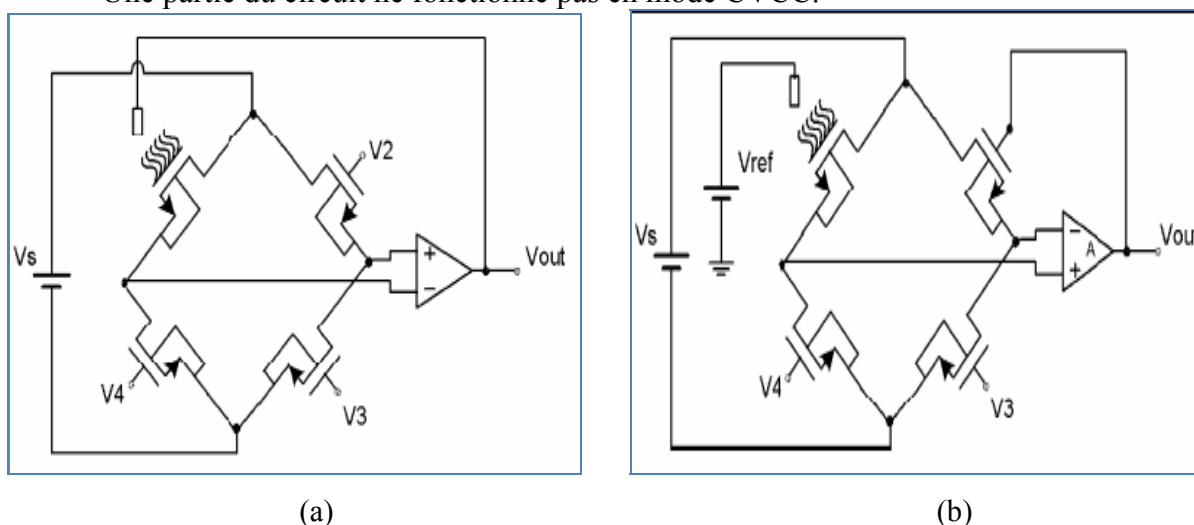


Figure IV.6 : Circuit de type pont de Wheatstone (a) Directe (b) indirect [58].

IV.4. Circuit différentiel avec le système ChemFET/ReFET

Pour augmenter la précision de mesure du potentiel électrochimique, le schéma électrique suivant a été proposé par M. Palan et al (figure IV.7) [59]. Ce circuit fonctionne avec des valeurs fixes du courant drain-source I_{ds} et de la tension drain-source V_{ds} constantes. Il est devenu classique et assez populaire.

L'architecture différentielle du ChemFET-mètre présentée sur la figure IV.7 se compose de deux blocs circuits et du convertisseur tension-courant. L'électrode de référence est à la masse et ne rajoute pas de potentiel supplémentaire dans la solution conductrice. Comme électrode de référence, on peut utiliser un fil en platine ou en or. Dans ce cas, il s'agit d'une pseudo-électrode parce que le potentiel sur l'interface électrode/liquide dépend de la composition de la solution.

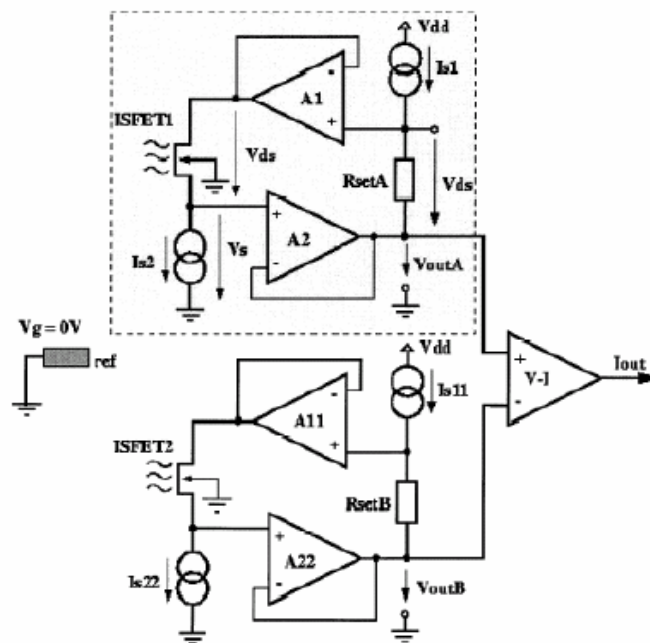


Figure IV.7: Schéma différentiel avec la paire ChemFET/ReFET

V. Présentation du simulateur ORCAD-PSPICE

ORCAD-PSPICE est un programme de simulation qui modélise le comportement d'un circuit électrique contenant des composants analogiques. Il est utilisé avec ORCAD Capture pour la conception. ORCAD-PSPICE permet l'analyse statique, transitoire et dynamique des circuits électroniques. Ainsi que l'analyse Paramétrique, Monte-Carlo, et de sensibilité.

Les circuits peuvent contenir des différents dispositifs électroniques résistances, condensateurs, inductances, des sources de tension et de courant, ainsi que des modèles de dispositifs actifs : diodes, transistors bipolaires, transistors à effet de champ à jonction... (une bibliothèque de modèles de plus de 11300 modèles analogiques). ORCAD-PSPICE supporte aussi la modélisation comportementale analogique donc on peut décrire les blocs fonctionnels des circuits avec des expressions mathématiques [60].

VI. Résultat de simulations (PSPICE)

La figure III-3 représente le composant ajouté à la bibliothèque du simulateur PSPICE après implémentation par un sub-circuit écrit en langage PSPICE.

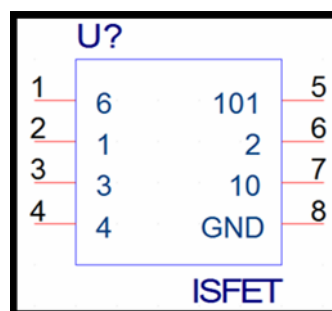


Figure IV.8: ISFET comme composant de la bibliothèque PSPICE.

Où : 6 : drain

1 : électrode de référence

3 : source

4 : bulk (substrat)

101 : pH de la solution

2 : interne

10 : interne et GND : masse (ground)

La simulation a été réalisée par le circuit de la figure III-4, le pH est remplacé par le potentiel de la solution sous forme d'une source de tension continue:

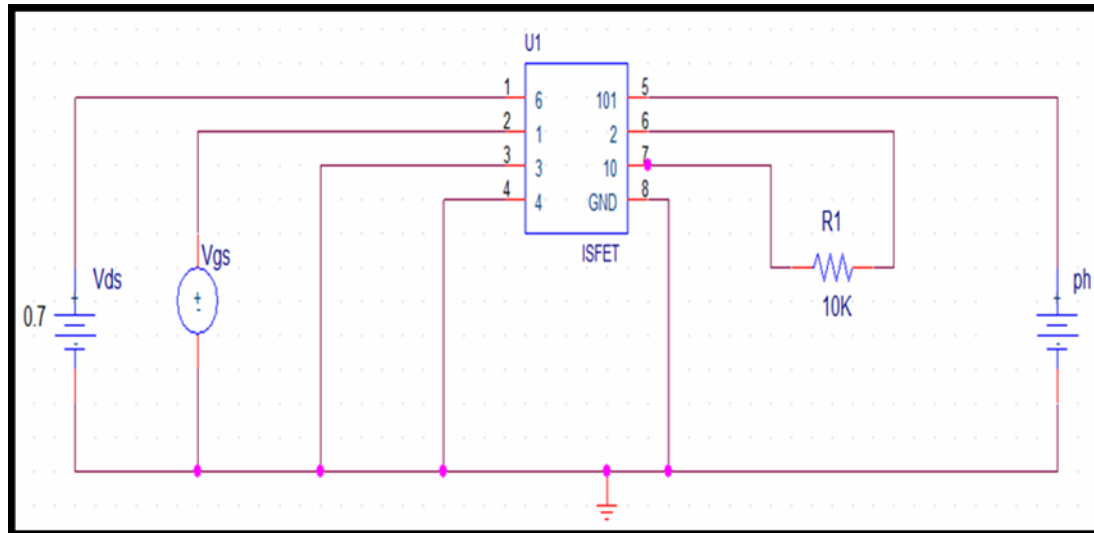


Figure IV.9 : Circuit de simulation des caractéristiques
 $I_{DS}(V_{GS}) : I_{DS}(V \text{ électrode de référence} - \text{source})$.

La caractéristique de transfert I_{DS} de V_{GS} à V_{DS} constante fait apparaître la liaison entre la tension grille-source V_{GS} et l'activité des ions hydrogène (pH), dans la solution, pour mesurer l'activité des ions, on utilise soit le régime linéaire de fonctionnement de l'ISFET, soit le régime de saturation parce que la sensibilité au pH ne dépend pas significativement du courant I_{DS} traversant le capteur.

Afin d'estimer la sensibilité du capteur à l'ion H^+ , nous avons effectué une analyse dans trois solutions tampons avec des pH à température ambiante pour une longueur du canal $L = 200\mu m$. Les caractéristiques que nous avons tracées sont des courbes $I_{DS}(V_{GS})$. La détermination de cette sensibilité se fait pour des valeurs fixes du courant I_{DS} et de la tension V_{DS} . La valeur de la tension V_{GS} qui en résulte donne alors la mesure du pH. Cette valeur est ensuite reportée sur un graphe en fonction du pH

- Une analyse « DC- SWEEP » pour différent V_{GS} de 0 à 10 V, en fait varier la tension V_{DS} de -0 à 12V et le pH à 7 pour une température $27^\circ C$ et $TOX = 1000 \text{ \AA}$, $L = 200 \mu m$ donne :

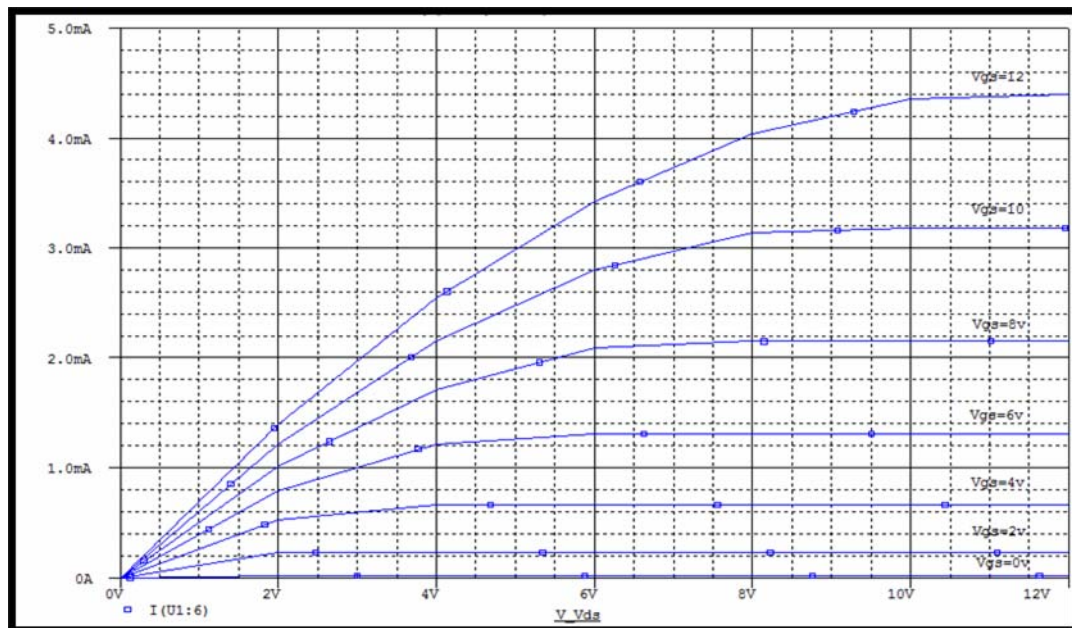


Figure IV.10 : Courbe de la caractéristique du pH-ISFET $I_{ds}=f(V_{ds})$

- Une analyse « DC- SWEEP » pour différent V_{ds} de 0 à 10 V, en fait varier la tension V_{gs} de 0 à 12V et le pH à

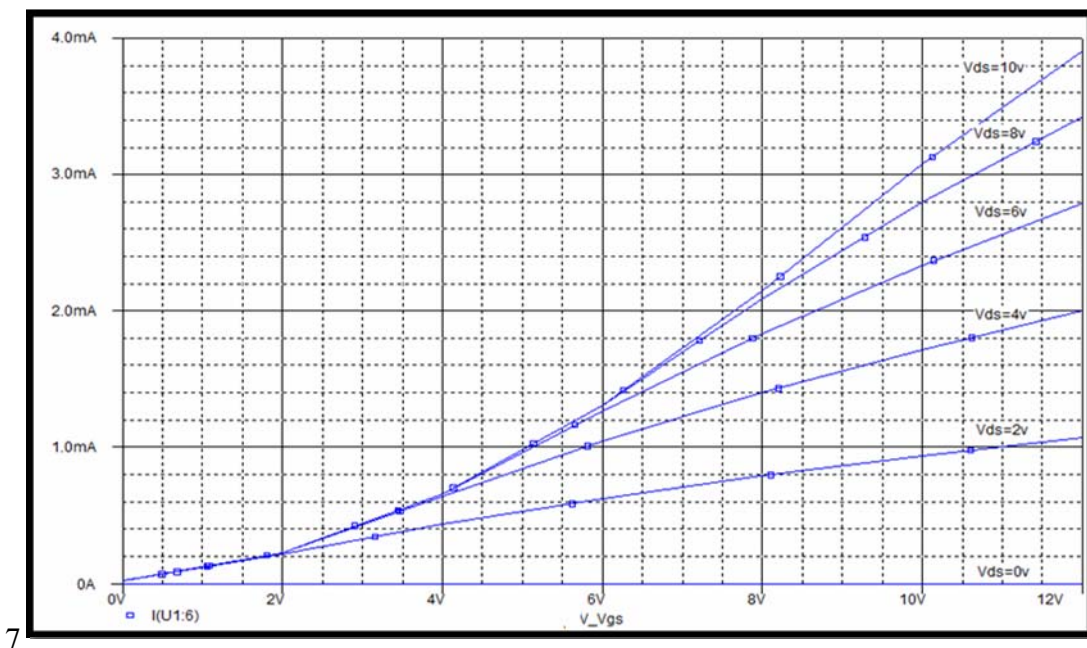


Figure IV.11 : Courbe de la caractéristique du pH-ISFET $I_{ds}=f(V_{gs})$ pour différent pH

Avec : L : longueur de canal. $L=200\mu\text{m}$

W: largeur de canal. $W=800\mu\text{m}$

T_{ox} : épaisseur de l'oxyde. $T_{ox}=100\text{nm}$

Température 27°C

Bien que les figures (IV.5- IV.6) présente une très bonne concordance de celle obtenue à partir de la modélisation numérique (voir chapitre III).

- Une analyse « DC- SWEEP », en fixant V_{ds} à 0.5 V, en fait varier la tension V_{gs} de -0.5 à 4V et pH prend les valeurs suivants 2 à 12 pour une température 27°C et $T_{ox}=1000 \text{ \AA}$ (épaisseur de l'oxyde), $L = 200 \text{ }\mu\text{m}$, donne les résultats suivants :

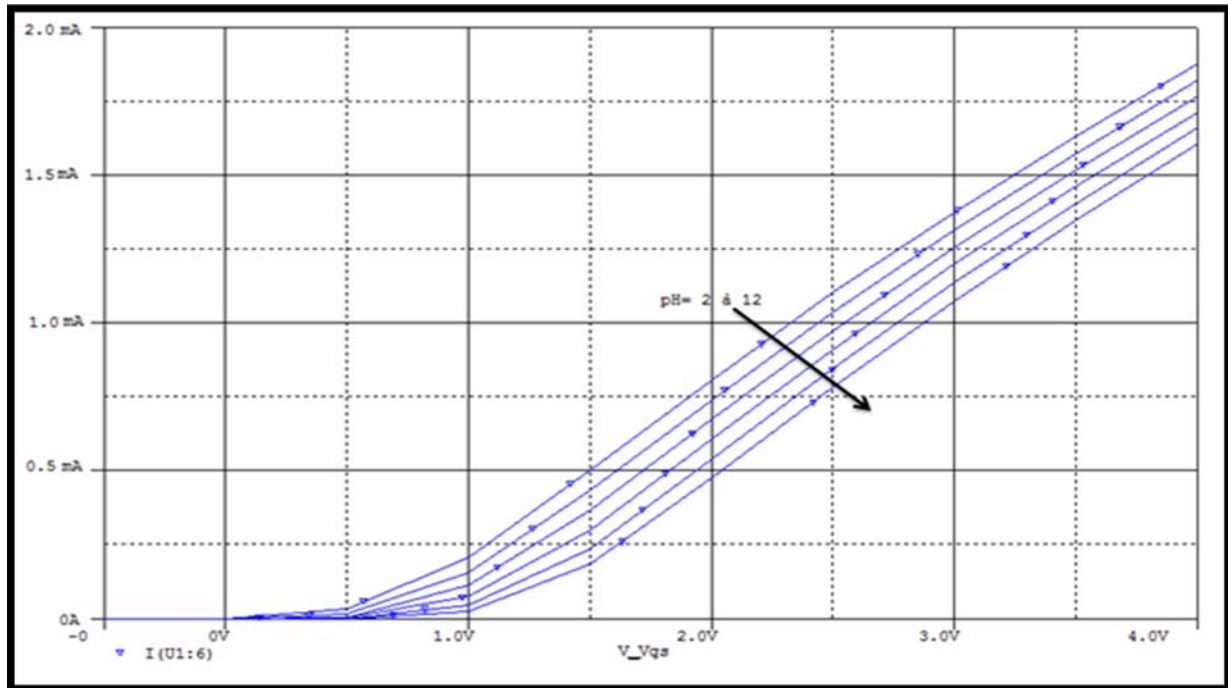


Figure IV.12 Réponse d'un capteur pH-ISFET dans trois solutions tampon de pH=4,7,10 ; I_{ds} de V_{gs} à $V_{ds}= 1.5\text{v}$

VII. Le Circuit de mesure conventionnel CVCC

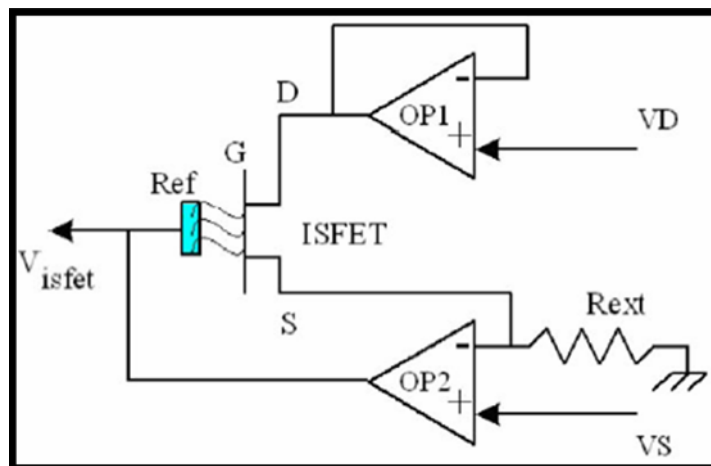
La membrane ion-sensible de l'ISFET génère un potentiel proportionnel au logarithme de l'activité des ions détectés, ce potentiel est mesuré par rapport au potentiel de l'électrode de référence à l'aide d'une méthode potentiométrique qui mesure la variation du pH traduite par le décalage correspond de la tension de seuil du dispositif ISFET.

Le circuit de mesure de la tension de sortie de la figure IV-13 détecte la concentration des ions de la solution en mode courant de drain constant et tension drain - source constante CVCC « *constant voltage constant current* » avec une électrode de référence émergée dans la solution de pH à mesurer [61,62].

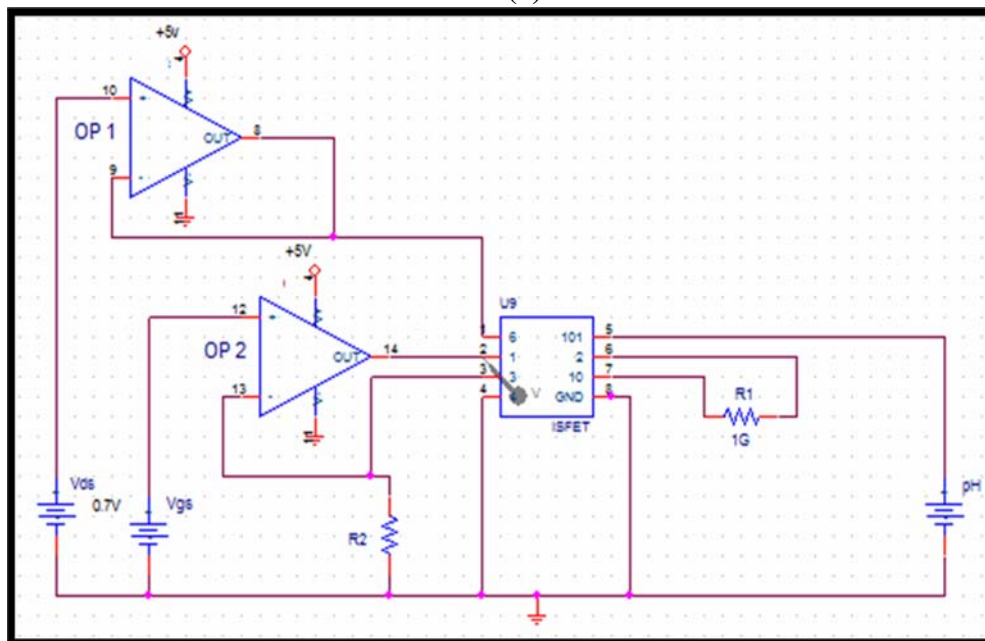
Avec cette configuration, deux tensions constantes 0,7 Volt et 0,2 Volt par exemple sont appliquées aux pôles positifs des deux amplificateurs opérationnels (entrées non-inverseurs)

pour maintenir la tension entre le drain (D) et la source (S) de l'ISFET constante à une valeur de 0,5 Volt, d'autre part la résistance (R_{ext}) peut être ajustée pour fixer le point de stabilité thermique « Athermal point » à un courant de drain constant [63].

Pour maintenir l'ISFET fonctionne dans la région linéaire de sa réponse $I_{ds} = f(V_{gs})$, les variations de la tension grille-source de sa tension de seuil doivent être directement proportionnelles aux variations des valeurs de pH. La différence de potentiel entre la grille ion-sensible (G) et l'électrode de référence (R_{ef}) est ainsi déterminée par la concentration en ions dans la solution.



(a)



(b)

Figure IV.13 : (a) - Schéma du circuit de mesure conventionnel CVCC à électrode de référence flottante [64].

(b) - Schéma de simulation PSPICE du circuit conventionnel de mesure CVCC à électrode de référence flottante.

La courbe ci-dessous (figure IV.14) montre finalement la sensibilité du capteur aux ions hydrogène dans les différents régimes de fonctionnement d'un capteur pH-ISFET: linéaire où saturé.

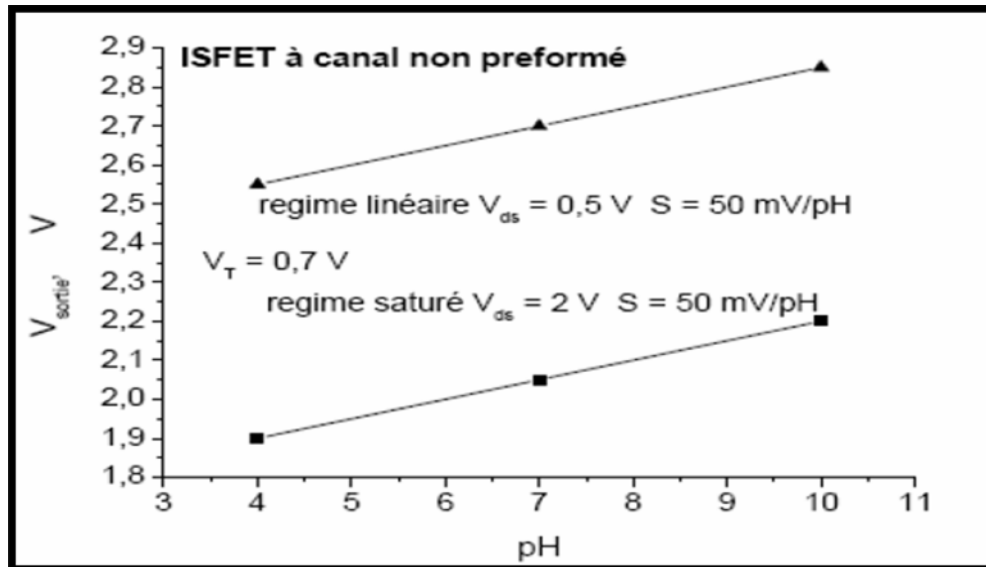


Figure IV.14 Courbes de la sensibilité expérimentale d'ISFET dans les différents régimes de fonctionnement du capteur [3].

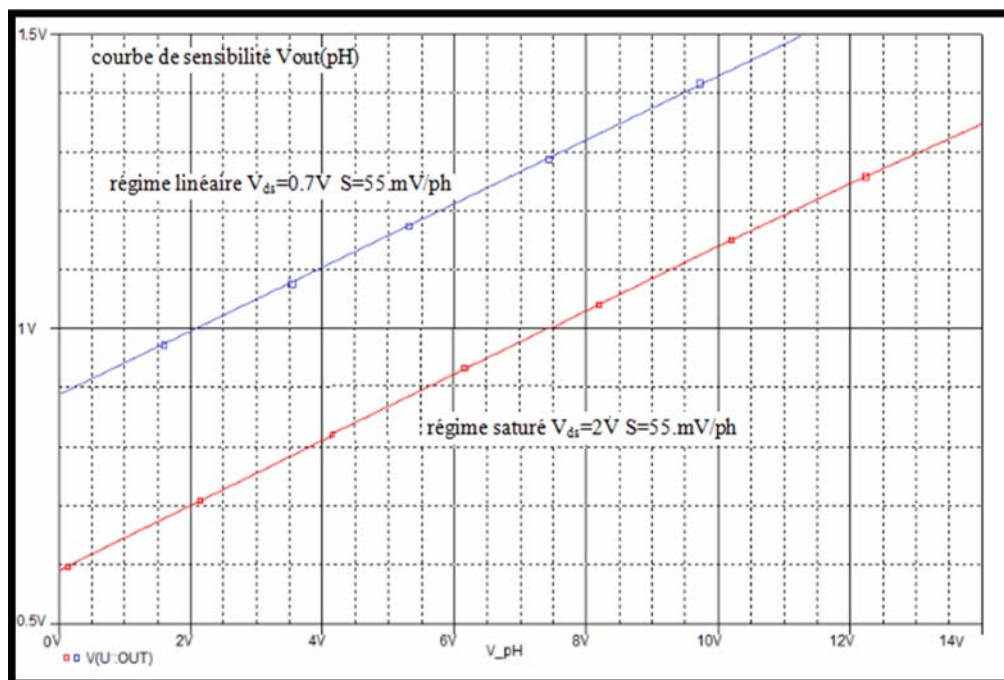


Figure IV.15 : Courbe de la sensibilité du circuit pour $\text{pH}=0$ à 14 (Pspice).

On remarque une linéarité de la courbe (figure IV.14) dans l'intervalle $\text{pH} = 2$ à $\text{pH} = 14$. La pente nous donne la sensibilité du capteur ici égal à 55 mV/pH , cette valeur est presque Nernstienne qui nous donne une très bonne sensibilité de notre capteur. Bien que le circuit conventionnel de mesure (CVCC) présente une très bonne concordance entre les résultats obtenu et les résultats de la figure (IV.15).

Le circuit de mesure de la figure IV.13 présente l'avantage d'être facile à implémenter dans des circuits intégrés. Le signal de sortie est mesuré à la sortie de l'amplificateur opérationnel OP2 connectée à l'électrode de référence R_{ef} .

Configuration	Circuiterie	Signal de sortie	Application
CVCC conventionnel électrode flottante	compliqué : Deux Ampli-Op & Une source band-gap Reference	Source connectée Au point commun, Grille flottante	Plus adaptable à un seul Capteur ISFET spécifique.
Circuit CVCC de type pont Source flottante	Simple : Un seul Ampli-Op & Diode Zener	Grille connectée, Source flottante	Utilisable pour les systèmes Multi-capteurs et les capteurs dont les caractéristiques sont inconnues.

VIII. Conception d'une carte d'interface pour un banc de mesure pour capteur ISFET

Dans tes travaux en perspective nous projetons à la mise au point d'un banc de mesure, pour la caractérisation du capteur étudié, ceci nous permettra entre autres de comparer les résultats expérimentaux avec les résultats théorique obtenus dans le chapitre III, nous pourrons ainsi valider notre modèle du capteur pH-ISFET.

VIII.1. Principe

Le schéma synoptique suivant illustre le système de contrôle et d'acquisition conçu et que nous voulons réaliser pour remplir la tâche prévue par cette technique.

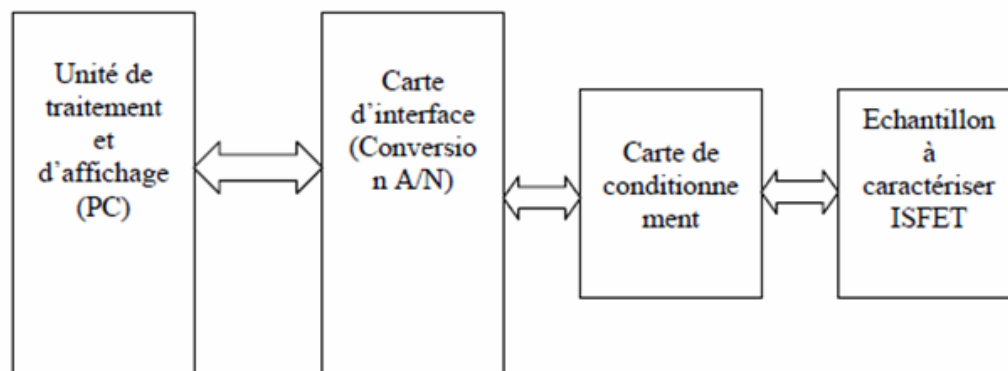


Figure IV.16 : Schéma bloc du dispositif expérimental

Nous avons voulu réaliser un système où nous pourrions générer une tension de polarisation de la grille V_g , avec une possibilité de faire varier l'amplitude, c'est pour cela que nous avons fixé les valeurs du courant drain source et de la tension drain source.

Pour éviter autant possible que le dispositif soit sensible aux effets de l'environnement, nous avons évité mettre l'ISFET comme dispositif d'entrée et que sa résistance soit à l'entrée de l'ampli op.

VIII.2. Description du circuit

Le circuit présenté sur la figure se compose de deux amplificateurs et quelques résistances et une capa et est entouré par de nombreux périphériques intégrés (miroir de courant, latch, convertisseur analogique numérique). Le schéma électrique simple et original garantit une mesure directe et fiable. L'alimentation extérieure de +5V est assurée par un générateur de tension. Le circuit polarise le capteur avec des valeurs de tension drain source V_{ds} et de courant drain-source I_{ds} , fixes, grâce à la contre-réaction appliquée directement sur l'électrode de référence. Au final, la tension de seuil du ChemFET (ISFET) est mesurée sur l'électrode de référence. Enfin, les valeurs de la tension drain source V_{ds} et du courant drain-source I_{ds} sont ajustables à l'aide des potentiomètres (nous parlons de potentiomètres car les résistances sont variables).

La tension drain-source V_{ds} des capteurs est fixée par le potentiomètre R1 et les amplificateurs. Le courant drain-source I_{ds} est déterminé par les potentiomètres R2, R3. Dès que l'activité des ions dans la solution change, les amplificateurs pilotent les grilles de telle manière que le courant drain-source et la tension drain-source gardent les valeurs définies au départ. Notons, que la caractérisation des ChemFETs avec le montage est réalisable à la condition que le capteur fonctionne avec une tension grille source égale ou supérieure à zéro volt ($V_{gs} \geq 0V$).

L'information issue de la variation de la tension de sortie de la structure ISFET en fonction de V_{gs} (la concentration des ions au niveau de la solution à caractériser) mesurée par le circuit de conditionnement se présentera alors au circuit de conversion où elle sera convertie par un ADC 804.

Le déclenchement de la conversion parviendra du PC via la broche D4 du PC connectée à la ligne \overline{WR} du CAN (RD, CS toujours à la masse). L'octet transféré sera stocké dans le latch 74HC241, afin d'être transmis sous forme de quartet vers le PC.

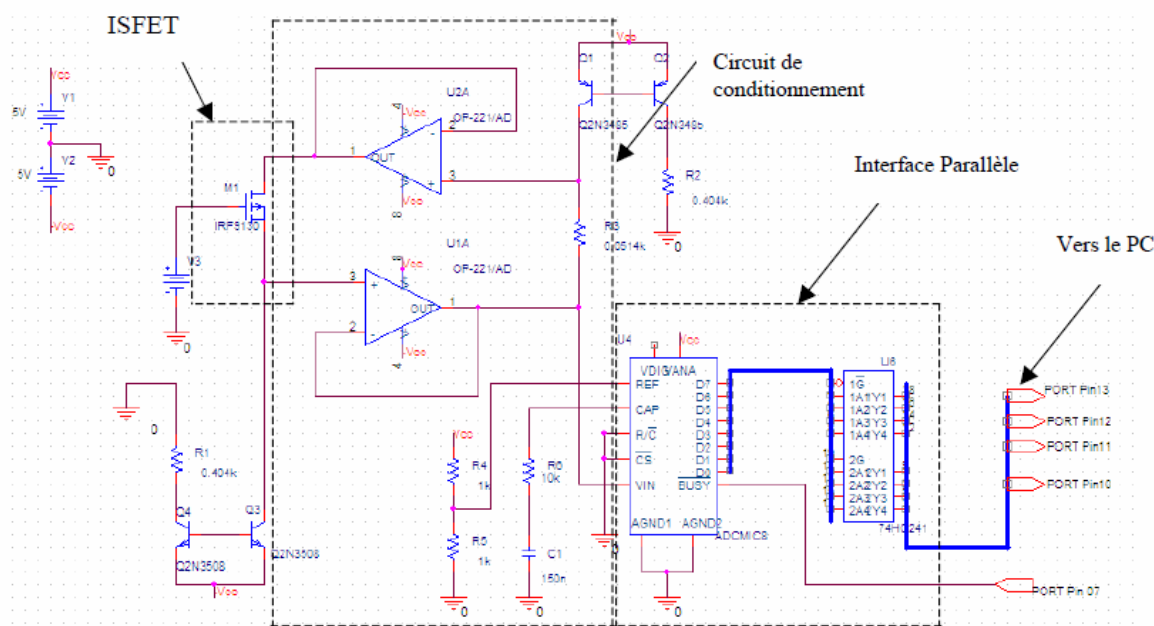


Figure IV.17: Le circuit de la carte d'interface de test pour PSpice

IX. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le macro modèle du micro-capteur pH - ISFET conçu à l'aide de résultat de la modélisation numérique obtenu au chapitre précédent. Enfin nous avons intégré le comportement électrostatique sous forme d'un composant électronique dans la bibliothèque du simulateur ORCAD-PSPICE, son implémentation nous a permis de tester ses caractéristique tension courant dans un circuit électrique.

Sous l'influence des variations du pH, des tensions de polarisation, et de deux paramètres technologiques : l'épaisseur d'oxyde et la longueur du canal, il nous a été permis d'établir très efficacement les limite de notre modèle présenté au par avent.

En effet, on a remarqué une bonne concordance entre notre modèle développé par la modélisation numérique avec PDEtool et les résultats des simulations du macro-modèle intégré dans la bibliothèque de simulateur PSpice et implanté dans des circuits électriques.

Finalement nous rappelons que le développement d'une interface de mesure de pH s'avère possible à l'aide du circuit de mesure conventionnel CCCV à deux amplificateurs opérationnels associés à un ISFET avec l'électrode de référence intégrée.

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

L'objectif de notre étude était de modéliser et de simuler un micro-capteur chimique pH-ISFET que nous pourrions intégrer dans la bibliothèque du simulateur de circuit PSpice.

A travers notre étude, la technologie de fabrication du capteur pH-ISFET repose sur un transistor MOS à grille diélectrique (sans grille métallique), l'oxyde de silicium SiO_2 et le nitrure de silicium Si_3N_4 constituent l'isolant de cette structure mais peuvent toute aussi bien jouer le rôle de la couche ionosensible, la présence d'ions auprès de la couche d'isolant crée un potentiel dans cette région qui se traduit par un décalage de la tension de seuil du dispositif lors de l'application d'une tension de caractérisation sur la grille du capteur remplacée par rapport à un transistor MOS par une électrode de référence et une solution d'analyse. Ce décalage de la tension de seuil du transistor pH-ISFET traduit la variation du pH de la solution à analyser.

Ainsi les travaux présentés dans ce mémoire ont consisté aux développements d'un modèle décrivant les interactions entre les différents phénomènes physiques se produisant soit dans l'électrolyte ou dans le MOS, pour cela il était nécessaire de coupler entre plusieurs équations régissant les phénomènes électrostatiques, d'écoulements micro-fluidique et de diffusion. Nous avons par la suite étudié l'adaptation des couches ionosensible dans le modèle.

Nous nous sommes intéressé principalement à l'élaboration des modèles numériques basés sur la méthode des éléments finis permettant l'étude de la variation du potentiel en deux dimensions dans le transistor MOSFET et dans l'électrolyte. Les résultats ont montré que le potentiel à l'interface oxyde/électrolyte dépend de la concentration des ions H^+ dans l'électrolyte. Par contre le potentiel à l'interface oxyde/semiconducteur varie uniquement avec les tensions de polarisation V_{gs} et V_{ds} , ce potentiel ne dépend pas des caractéristiques du milieu à analyser.

L'étude de l'impact du choix de la membrane sur les caractéristiques électriques du capteur et surtout sur la sensibilité de L'ISFET nous a permis de développer un modèle qui décrit l'influence de la membrane. Les résultats ont montré une meilleure sensibilité du capteur à base d'une membrane en Si_3N_4 , en le comparant avec celle obtenue par utilisation d'une membrane en SiO_2 .

En perspective, nous optons à la mise au point d'un banc de mesure, pour la caractérisation du capteur étudié. Ceci nous permettra de mieux cerner les paramètres contrôlant la sensibilité du capteur.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Références Bibliographiques

- [1] P. Bergveld. « Development of an Ion-Sensitive solid-state device for Neurophysiological Measurements», IEEE Trans Biomed Eng., 1970, BME-17, pp. 70-71.
- [2] Anh Tuan Mai. « Développement des biocapteurs électrochimiques pour la détection des polluants organiques », thèse de doctorat, Université Claude Bernard, Lyon1, 2004.
- [3] I. Humenyuk. « Développement des micro-capteurs chimiques ChemFETs pour l'analyse de l'eau », Thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2005
- [4] Bansi D. Malhotra, Rahul Dinghal, Asha Chaubey, Sharma K. Sharma and Ashok Kumar. 'Recent trends in biosensor', Curent Applied Physics, Vol. 5, 2005, pp. 92-97
- [5] F. Reymond, D. Fermin, Hye Jin Lee, H. Girault. 'Electrochemistry at liquid/ liquid interfaces: methodology and potential applications', Electrochimica acta, Vol.45, 2000, pp.2647-2662.
- [6] D. R. Thévenot, K.Toth, Richard A. Durst, G. S. Wilson: 'Electrochemical biosensors: recommended definitions and classification', Biosensors and Bioelectronics, Vol.16, 2001, pp.121-131
- [7] M. Cole, J. W. Garadner, A. W Y. Lim, P. K. Scivier, J.E. Brignell : 'Polymeric resistive bridge gas sensor array driven by a standard cell CMOS curent drive chip', Sensors and Actuators B, Vol. 58, 1999,pp.518-525
- [8] Georges Asch : 'les capteurs en instrumentation industrielle', 5^{eme} édition, Dunod 1999.
- [9] Capteurs chimiques et biochimiques, Nicole JAFFREZIC-RENAULT Club Microcapteurs Chimiques (CMC2) Laboratoire de Physicochimie des Interfaces (URA CNRS 404) de l'École Centrale de Lyon.
- [10] <http://www.ino.ca/fr-ca/404.html>
- [11] A.Tuan MAI « Développement des biocapteurs electrochimique a base de tyrosinase pour la detection des polluants organiques en phase aqueuse ». Thèse de doctorat. L'université de CLAUDE BERNARD - LYON 1.2002.
- [12] H. Mathieu, « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques », Masson (1987) 363.
- [13] L. Bousse and P. Bergveld, «Sensors and Actuators», 6(1), (1986) 65.
- [14] <http://www.probiotics.com/html/ProbioticProducts/PicturesofProbiotics.html>
- [15] B. Torbiero. « Développement de micro-capteurs électrochimiques pour l'analyse en phase liquide », thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2006.

- [16] S.M.Sze : “Physics of Semiconductors Divices”, Wiley,New-York, 2^{ème} edition 1981.
- [17] Luc Bousse : “ Single electrode potentials related to Flat-Band voltage measurements on EOS and MOS structure”, J. chem phys. Vol76, n°10, Mai 1982.
- [18] J. Lyklema Fundamentals of interface and colloid science volume2: Solid-Liquid interfaces
- [19] M.S. Kilic, M.Z. Bazant, ‘Steric effects in the dynamics of electrolytes at large applied voltages. I. Double-layer charging’, *Physical Review E* **75**, 021502 (2007).
- [20] G. Högg, O. Lutze, K. Cammann, « Novel membrane material for ion-selective field-effect transistors with extended lifetime and improved selectivity, *Analytica Chimica Acta*», Vol. 335, 1996, p. 103-109.
- [21] S. Rochefeuille, C. Jimenez, S. Tingry, P. Seta and J. P. Desfours, Mixed « Langmuir–Blodgett monolayers containing carboxylic ionophores. Application to Na⁺ and Ca²⁺ ISFET-based sensors, *Materials Science and Engineering: C*», Vol. 21, 2002, p. 43-46.
- [22] P. Bergveld «ISFET, Theory and Practice», IEEE Sensor Conference Toronto, October 2003
- [23] Fayçal Djeflal, « Modélisation et simulation prédictive du transistor MOSFET fortement submicronique. Application à la conception des dispositifs intégrés », Thèse de Doctorat, Université de Batna, Avril 2006.
- [24] M. A. Pinsky, «Partial Differential Equation and Boundary Value Problems with Applications», Mc Graw Hill, 1998.
- [25] E. Kreyszig, «Advanced Engineering Mathematics”, Jhon Wiley and Sons, 1983.
- [26] M. D. Greeberg, «Application of Green’s functions in science and engineering» Prentice Hall, New Jersey, 1971.
- [27] J. Jin, «Finite Element Method in Electromagnetics», John Wiley and Sons, 1983.
- [28] G. Dhatt, G. Touzot, « une presentation de la méthode des éléments finis », Presses de l’Université Laval, 1981.
- [29] C. D. Fung, P. W. Cheung, W. H. Ko, A generalized theory of an electrolyte-insulator-semiconductor field-effect transistor” , *IEEE Trans. Elcetron Devices* ED-33 (1), pp. 3-18, 1986.
- [30] Mohamed Amir ABDI. « Modélisation de l’inverse de la pente sous seuil des transistors FETs nanométriques ». Thèse de magister, Université de Batna.
- [31] Résolution d’equations aux dérivées partielles non linéaires et couplées Stéphanie Marchesseau Dimitri Bettebghor Ecole des Mines de Nancy, 2006-2007
- [32] <http://www.comsol.com/support/knowledgebase/browse/900/>

- [33] Comsol Multiphysics user's guide
- [34] Semiconductor device volume, 2 Shashi Phoha Thomas LaPorta Christopher Griffin
- [35] A. Errachid, A. Ivorra, J. Aguiló, R. Villa, N. Zine, J.Bausells. Implementation of multisensor silicon needles for cardiac applications, *Sensors and Actuators B* 78, (2001) 279-284.
- [36] A Berle, Armin, G Glunz, Warta Wilhelm. Impact of illumination level and oxide. American Institute of physics. *Journal of Applied Physics*.
- [37] C. D. Fung, P. W. Cheung, W. H. Ko, A generalized theory of an electrolyte-insulator-semiconductor field-effect transistor", *IEEE Trans. Elcetron Devices* ED-33 (1), pp. 3-18, 1986.
- [38] E. Boridy, 'Electromagnétisme, théories et applications', ISBN 2-7605-0376-3, 1990.
- [39] Numerical Simulation of the Electrical Double Layer Based on the Poisson-Boltzmann Models for AC Electroosmosis Flows Pascale Pham, Matthieu Howorth, Anne Planat Chrétien and Sedat Tardu
- [40] L. Renaud, 'Etudes de systèmes microfluidiques : application à l'électrophorèse sur puces polymères', Thèse de Doctorat, Université Claude Bernard – Lyon1, juillet 2004.
- [41] M.S. Kilic, M.Z. Bazant, 'Steric effects in the dynamics of electrolytes at large applied voltages. I. Double-layer charging', *Physical Review E* **75**, 021502 (2007).
- [42] P. Pham, A.S. Larrea, R. Blanc, F. Revol- Cavalier, I. Texier, F. Perraut, 'Numerical design of a 3D microsystem for DNA dielectrophoresis: the pyramidal microdevice', *Journal of Electrostatics*, 65 (2007) 511-520
- [43] N. G. Green, A. Ramos, A. Gonzales, H. Morgan , A. Castellanos, 'Fluid flow induced by nonuniform ac fields in electrolytes on microelectrodes. III Observation of streamlines and numerical simulation', *Physical review E*, 66 026305 (2002).
- [44] S. Tardu, 'The electrical double layer effect on the microchannel flow stability and heat transfer', *Superlattices and Microstructures* 35 (2004) 513-529.
- [45] A. Castellanos, A. Ramos, A. Gonzales, N G Green, H. Morgan, 'Electrohydrodynamics and dielectrophoresis in Microsystems: scaling laws', *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** (2003) 2584-2597.
- [46] M.Z. Bazant, K. Thornton, A. Adjari, 'Diffuse-charge dynamics in electrochemical systems', *Physical review E*, **70** 021506 (2004).
- [47] P.W. Atkins, 'Physical Chemistry', 5th edition, ISBN 0-19-855731-0, 1994.
- [48] N. G. Green, A. Ramos, A. Gonzales, H.Morgan , A. Castellanos, 'Fluid flow induced by

nonuniform ac fields in electrolytes on microelectrodes. III Observation of streamlines and numerical simulation', *Physical review E*, 66 026305 (2002).

[49] L.Bousse, N.F. de Rooij, P. Bergveld, Operation of chemically sensitive field-effect sensors as a function of the insulator-electrolyte interface, *IEEE Trans. on Electron Devices ED 30*, 1986 p.1263-1270

[50] G. Asch, Les capteurs en instrumentation industrielle, Bordas, Paris, 1987, p. 451

[51] C. Fung, P. Cheung, H. Ko, A generalized theory of an Electrolyte-insulator-semiconductor field-effect transistor, *IEEE Trans. on Electron Devices ED 33*, 1986 p. 9-19

[52] Grattorola M., Massobrio G. Modeling, H⁺ - Sensitive FET's with SPICE, *IEEE Transactions on electron devices*, vol. 39, No. 4, 1992

[53] S-S Jan, Y-C Chen, J-C Cho, P-J Jan, C-C Cheng Preparation and properties of hydrogen ion-sensitive field affect transistors with sol-gel-derived Mg-modified lead titanate gate, *Journal of Non-Crystalline Solids* 332, 2003, p. 11-19

[54] S. Gumenijuk, B Podlepetsky, M. Nikiforova, K. Ledovsky, Evaluation of hydrogen sensivity and measuring range of testing the electrical characteristics, Eurosensors XIV, 2000

[55] P.A Hammond, D.Ali, D.R.S Cumming A single-chip pH sensor Fabricated by a Conventional CMOS process, *Sensors, Proceedings of IEEE*, Vol.1, 2002,p.350-355

[56] A. Morgenshtein , L. Sudakov-Boreysha, U. Dinnar, G. Jakobson, Y. Nemirovsky, Wheatstone-Bridge readout interface for ISFET/REFET applications, *Sensors and Actuators B* 98, 2004, p. 18-27

[57] T. Pechstein. U. S. Patent No. 6624637, September 2003.

[58] A. Morgenshtein, L. Sudakov-Boreysha, U. Dinnar, C. G. Jakobson, Y. Nemirovsky. Wheatstone -Bridge readout interface for ISFET/REFET applications, *Sens. Actuators B, Chem* 98, pp. 18-27, 2004

[59] C. D. Fung, P. W. Cheung, W. H. Ko, A generalized theory of an electrolyte-insulatorsemiconductor field-effect transistor" , *IEEE Trans. Elcetron Devices ED-33* (1), pp. 3-18, 1986.

[60] Cadence, "*PSpice A/D Reference Guide*". *Product Version 10.0 June 2003*

[61] P. Bergveld and A. Sibbald, Analytical and Biomedical Applications of Ion-Selective Field-effect Transistors, Wilson and Wilson's Comprehensive Analytical Chemistry, vol. 23, edited by G. Svehla, Elsevier, 1988.

[62] Danny Wen-Yaw Chung, Dorota G. Pijanowska, Wladyslaw Torbicz, Pei-Cheng Wang, Heh-Sen Lin, Gow-Long Dong, Ming-Yi You, CMOS Integrated Circuit and System Design

for Ion-Sensitive FET-based Biosensor Applications, Journal of Biocybernetics and Biomedical Engineering, pp.87- 106, Vol. 21, No. 4, 2001.

[63] Carsten Engels, "pH Measurement Today and Tomorrow", Sentron Integrated Technology, The Netherlands, 1995.

[64] C-H. Yang. ISFET Performance Enhancement by Mixed-Mode Signal Processing, Thèse Ph.D, Chung Yuan Christian university, Tawain, 2005.

Résumé

L'intérêt porté aux micro-capteurs électrochimiques ChemFET (Chemical Field Effect Transistor) ne cesse de croître, stimulé par leurs nombreuses applications. Au cours de ce mémoire, nous nous sommes intéressés à l'étude d'un micro-capteur chimique pH-ISFET. Ainsi les travaux présentés dans ce mémoire ont consisté aux développements d'un modèle décrivant les interactions entre les différents phénomènes physiques se produisant soit dans l'électrolyte ou dans le MOS, pour cela il était nécessaire de coupler entre plusieurs équations régissant les phénomènes électrostatiques, d'écoulements micro-fluidique et de diffusion. Nous avons par la suite étudié l'adaptation des couches ionosensibles dans le modèle.

L'élaboration des modèles numériques basés sur la méthode des éléments finis moyennant Comsol Multiphysics a permis d'étudier essentiellement la variation du potentiel et l'influence de quelques phénomènes sur ce potentiel comme : la diffusion des porteurs de charge et de la vitesse d'écoulement du fluide. Une interface entre le logiciel Comsol multiphysics et PSpice a permis d'extraire la structure du modèle en langage PSpice à l'aide d'une netlist, et de former un micro-modèle du capteur ISFET, utilisé ensuite dans des circuits de mesure conventionnels pour la mesure de la sensibilité du capteur au pH.

Abstract

The interest in electrochemical microsensors ChemFETs (Chemical Field Effect Transistor) continues unabated, stimulated by its wide range of applications. During this work, we summons ourselves to interest in the study of a chemical microsensor pH-ISFET. Thus the work presented in this memory consisted with the developments of a model describing the interactions between the various physical phenomena occurring in the electrolyte or the MOS, for that it necessary of was coupled between several equations governing the electrostatic phenomena, of flows microphone-fluidic and diffusion. We thereafter studied the ionosensible adaptation of the layers in the model.

The development of the numerical models based on the finite element method with the help of Comsol Multiphysics made it possible to primarily study the variation of the potential and the influence of some phenomena on this potential like: diffusion of the charge carriers and rate of flow of the fluid. An interface between the software Comsol multiphysics and PSpice made it possible to extract the structure of the model in PSpice language using a netlist, and to form a microphone-model of sensor ISFET, used then in measuring circuits conventional for the measurement of the sensitivity of the sensor to the pH.